

KLAPCSIK KÁLMÁN
DIPLOMATERV

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
GÉPÉSZMÉRNÖKI KAR
HIDRODINAMIKAI RENDSZEREK TANSZÉK



DIPLOMATERVEK

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
GÉPÉSZMÉRNÖKI KAR
HIDRODINAMIKAI RENDSZEREK TANSZÉK

KLAPCSIK KÁLMÁN
DIPLOMATERV
Spektrál módszer alkalmazása a hő- és áramlástanban

Konzulens:

Dr. Hegedűs Ferenc
Adjunktus

Témavezető:

Dr. Hegedűs Ferenc
Adjunktus

Budapest, 2014

Szerzői jog © Klapcsik Kálmán, 2014.

Szerzői jog © Dr. Hegedűs Ferenc, 2014.

NYILATKOZATOK

Elfogadási nyilatkozat

Ezen tervezési feladat a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Hidrodinamikai Rendszerek Tanszéke által a Diplomatervezési és Szakdolgozat feladatokra előírt valamennyi tartalmi és formai követelménynek maradéktalanul eleget tesz. E tervezési feladatot bírálatra és nyilvános előadásra alkalmasnak tartom.

A beadás időpontja:

témavezető

Nyilatkozat az önálló munkáról

Alulírott, *Klapcsik Kálmán* (LDVQGW), a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem hallgatója, büntetőjogi és fegyelmi felelősségem tudatában kijelentem és sajátkezű aláírással igazolom, hogy ezt a diplomatervet/szakdolgozatot meg nem engedett segítség nélkül, saját magam készítettem, és a tervezési/szakdolgozat, ill. diplomaterv feladatomban csak a megadott forrásokat használtam fel. Minden olyan részt, melyet szó szerint vagy azonos értelemben, de átfogalmazva más forrásból átvettem, egyértelműen, a forrás megadásával megjelöltem.

Budapest, 2014. December 12.

szigorló hallgató

TARTALOMJEGYZÉK

Előszó	xiii
Jelölések jegyzéke	xv
1. Bevezetés.....	17
1.1. Célkitűzések.....	17
1.2. Spektrál módszer történeti áttekintése	18
1.3. Áramlástechnikai alkalmazások	20
1.4. Egy egyszerű példa.....	24
1.4.1. Hővezetés analitikus megoldása	25
1.4.2. Másodrendű véges differencia módszer	26
1.4.3. Galerkin módszer, legkisebb négyzetek módszere.....	29
1.4.4. Következtetések és kérdések	32
2. Spektrál Módszer Matematika Hátttere	36
2.1. Interpoláció, pszeudó spektrál módszer	38
2.1.1. Polinomiális interpoláció	38
2.1.2. Diszkrét legkisebb négyzetek módszere	39
2.1.3. Stabilitási problémák	41
2.2. Galerkin módszer numerikus integrálással	43
2.2.1. Numerikus integrálás.....	43
2.2.1.1. Ortogonalitás	44
2.2.1.2. Pszeudó spektrál háló	45
2.2.2. Nem periodikus perem	46
2.2.2.1. Roots Grid	47
2.2.2.2. Extrema plus Endpoints Grid	49
2.2.3. Periodikus perem.....	51
2.2.3.1. Extrema Grid	52
2.2.3.2. Roots Grid	54
2.2.3.3. Eltolt háló	56
2.2.4. Mátrix Szorzat Transzformáció	57
2.3. Deriváló mátrix	58
2.3.1. Mátrix szorzat transzformáción keresztül	58
2.3.2. A deriváló mátrix elemeinek analitikus meghatározása.....	59
2.4. Deriváló Mátrixok szimmetrikus problémák megoldásához.....	59
2.4.1. Szimmetrikus háló és deriváló mátrix	61
3. Hővezetés (Parabolikus Parciális Differenciál Egyenlet).....	65
3.1. Nem periodikus peremfeltétel	65

3.1.1. Példa nem periodikus peremre	66
3.2. Periodikus peremfeltétel	67
3.2.1. Példa periodikus peremfeltételre	68
4. Hullámegyenlet (Hiperbolikus Parciális Differenciál Egyenlet).....	70
4.1. Analitikus megoldás	71
4.1.1. Rugalmas rúd nem nulla kezdeti elmozdulással.....	71
4.1.2. Rugalmas rúd nem nulla kezdeti sebességgel	71
4.1.3. Rugalmas rúd általános eset	72
4.2. A fáziskésés szemléltetése	72
4.3. Nem periodikus peremfeltétel.....	73
4.3.1. Példa nem periodikus peremre	74
4.4. Periodikus peremfeltétel	76
4.4.1. Példa nem periodikus peremfeltételre	77
5. Buborékmodell	79
5.1. Matematikai modell	79
5.1.1. Buborék lengését leíró egyenlet	79
5.1.2. A buborék belseje (Gáztér).....	80
5.1.3. A buboréktól távol (Folyadéktér).....	81
5.1.4. Peremfeltételek	81
5.2. A megoldandó közösleges differenciálegyenlet rendszer	82
5.2.1. A számítási tartomány	82
5.2.2. A dimenziótlan egyenletrendszer.....	83
5.2.3. A peremfeltételek kezelése	84
5.2.4. A közösleges differenciálegyenlet rendszer.....	85
5.3. A megoldási módszerek összehasonlítása.....	86
5.4. Tovább lépési lehetőség.....	89
6. Összefoglalás	90
7. Kitekintés.....	93
8. Summary	97
9. Irodalomjegyzék.....	99
Appendix A. Matematikai alapok	102
A.1. Lineáris terek és tulajdonságai.....	102
A.1.1. Lineáris terek.....	102
A.1.2. Ortogonalitás.....	104
A.1.3. Ortogonális Projekció.....	105
Appendix B. Deriváló Mátrixok levezetése.....	107
B.1. Fourier rendszer.....	107
B.2. Chebyshev rendszer	108
B.2.1. Roots Grid.....	109

B.2.2. Extrema Grid	111
Appendix C. A Buborékmodellhez kapcsolódó levezetések.....	116
C.1. Koordináta transzformáció	116
C.1.1. Energiaegyenlet a buborék belsejében.....	116
C.1.2. Energiaegyenlet a folyadék térben	117
Appendix D. Matlab kódrészletek.....	119
D.1. Hővezetési egyenlet megoldása másodrendű centrális differencia sémával	119
D.2. Hővezetési egyenlet megoldása Galerkin spektrál módszerrel	120
D.3. Hővezetési példa megoldása kollokációs módszerrel, nem periodikus perem.....	121
D.4. Hővezetési példa megoldása kollokációs módszerrel, periodikus perem.....	122
D.5. Hullámegyenlet megoldása kollokációs módszerrel, nem periodikus perem.....	123
D.6. Hullámegyenlet megoldása kollokációs módszerrel, periodikus perem..	124

ELŐSZÓ

A dolgozatban a parciális differenciálegyenletek egy kevésbé ismert numerikus megoldási módszerét, a spektrál módszert ismertetjük meg az olvasóval. Bemutatjuk a módszer matematikai hátterét, valamint az előnyeit, és hátrányait, különböző alkalmazási példákon keresztül. A spektrál módszer témakörében számos idegen nyelvű könyv, és folyóiratcikk áll rendelkezésre, viszont ezek nehezen érthetőek és sok utánajárás szükséges, mire valaki önállóan képes spektrál parciális differenciálegyenlet megoldó kódot írni. A dolgozat kidolgozása során arra koncentráltunk, hogy a spektrál módszert minél érthetőbben, egyetemi hallgatók számára is feldolgozható formában mutassuk be. Nagy hangsúly fektettünk a matematikai alapok és a nehezen érthető levezetések bemutatására. Az elméleti ismereteken túl néhány egyszerű alkalmazási példán keresztül (hővezetés és hullámegyenlet) bemutatjuk programozási technikákat: parciális differenciálegyenlet felbontását közönséges differenciál egyenletrendszerre, általános peremfeltétel kezelési technikákat, szimmetriák kihasználásának lehetőségeit. Egy összetett nemlineáris parciális differenciálegyenlet rendszer (buborékmodell) spektrál módszerrel történő megoldására is mutatunk példát. Az Appendix fejezeteiben a megértést segítő Matlab kódrészletek is olvashatók, valamint a dolgozathoz csatolt CD mellékleten is elérhetők. A dolgozattal az első magyar nyelvű egyetemi jegyzetet is meg kívánjuk alapozni, a későbbiekben összetettebb problémák spektrál módszerrel történő megoldásaival kiegészítve.

* * *

Köszönettel tartozom a konzulensemnek, Dr. Hegedűs Ferencnek, aki MSc-s féléveim alatt végzett feladataimban (Önálló Feladat, TDK) hatalmas segítséget nyújtott, köztük e Diplomaterv elkészítésében is, valamint lehetőséget adott bekapcsolódni a tanszéken folyó kutatómunkába (OGÉT). A közös munka során rengeteget tanultam, és tananyagom túli ismereteket szereztem.

Köszönöm a szüleimnek, hogy végig támogatták egyetemi tanulmányaimat.

Budapest, 2014. December 12.

Klapcsik Kálmán

JELÖLÉSEK JEGYZÉKE

Spektrál módszerek jelölés rendszere

$\phi_n(x)$	n-edik bázisfüggvény
a_n	n-edik bázisfüggvény együtthatója
$w_m(x)$	ortogonális vetítése bázisa
$f(x)$	közelített függvény
$P_N(x)$	N-ed fokú közelítő függvény
$T_n(x)$	n-edik Chebyshev polinom
$F_n(x)$	n-edik Fourier bázis
$C_j(x)$	Lagrange karakterisztikus bázis (hálófüggő)
$\rho(x)$	súlyfüggvény
w_j	j-edik osztáspontban vett (diszkrét) súly
$R(x, a_n)$	reziduum
Φ	együttható mátrix
$\underline{\underline{D}}$	deriváló mátrix (háló és numerikus séma függő)
DoF	(„Degrees of Freedom”) szabadsági fok

Fizikai mennyiségek

3. Fejezetben előforduló mennyiségek:

λ	hővezetési tényező
ρ	sűrűség
c	állandó nyomáson vett fajhő
α	hőmérsékletvezetési tényező
$u(x, t)$	hőmérséklet eloszlás t időpontban
$f(x)$	kezdeti feltétel (hőmérsékleteloszlás)
T_0, T_L	peremfeltételek
L	rúd hossza

4. Fejezetben előforduló mennyiségek:

T	húzóerő
ρ	sűrűség
α	hullámterjedési sebesség

$u(x, t)$	a rúd elmozdulása x helyek t pillanatban
$f(x)$	kezdeti feltétel (elmozdulás)
$g(x)$	kezdeti feltétel (sebesség)
L	rúd hossza

5. Fejezetben előforduló mennyiségek:

$R(t)$	buboréksugár
$\dot{R}(t)$	buborékfal sebesség
p_∞	nyomás a buboréktól távol
T_∞	hőmérséklet a buboréktól távol
$p_G(t)$	gáznyomás a buborék belsejében
$p_L(t)$	folyadék nyomása a buborékfal mellett
$u_G(r, t)$	gáztér sebessége
$u_L(r, t)$	folyadéktér sebessége
$T_G(r, t)$	hőmérséklet mező a gáztérben
$T_L(r, t)$	hőmérséklet mező a folyadéktérben
κ	fajhőviszony
λ_G	a gáz hővezetési tényezője
λ_L	a folyadék hővezetési tényezője
c_{pL}	a folyadék állandó nyomáson vett fajhője
ρ_L	a folyadék sűrűsége
μ_L	a folyadék dinamikai viszkozitása
σ	felületi feszültség

1. BEVEZETÉS

1.1. Célkitűzések

Az alkalmazott matematikában és tudományos számításokban ismert numerikus módszerek egyik családja a spektrál módszer, mely differenciálegyenletek nagy pontosságú megoldására szolgál. A spektrál módszerek használhatóak közönséges differenciálegyenletek, parciális differenciálegyenletek és sajátérték problémák megoldásához. A módszer lényege, hogy az ismert vagy ismeretlen függvényt megfelelően megválasztott bázisfüggvények (például Fourier sor vagy Chebyshev polinomok) összegével közelítjük, majd megválasztjuk a bázisfüggvényekhez tartozó együtthatókat, úgy, hogy a reziduum (az egzakt és a numerikus megoldás különbsége) minimális legyen, vagyis a differenciálegyenlet és a peremfeltételek a lehető legpontosabban ki legyenek elégítve. A dolgozat célja a spektrál módszerek részletes bemutatása, a matematikai háttérének kidolgozása, előnyeinek és hátrányainak bemutatása egyszerű alkalmazási példákon keresztül.

A dolgozatban szakirodalmi hivatkozásokon keresztül áttekintjük a spektrál módszerek történeti háttérét, majd példákat mutatunk áramlástechnikai alkalmazásokra. Bemutatjuk a módszerek matematikai alapjait, a levezetéseket a klasszikus nem interpolációs (Galerkin) módszertől a modern interpolációs (kollokációs) módszerig. Nagy figyelmet fordítunk azokra a levezetésekre, amelyek nem triviálisak, megértésük nehézkes és a szakirodalomban is nehezen megtalálhatóak. A matematikában két gyakran előforduló parciális differenciálegyenleten, a hővezetési egyenleten és a hullámegyenleten keresztül vizsgáljuk a különböző numerikus sémák konvergencia sebességét és fázistartását (pontos megoldáshoz képesti időbeli eltolódás). A két egyszerű példa megoldása során szerzett tapasztalatokat felhasználva, egy bonyolultabb alkalmazási példán (buborékmodell) keresztül mutatjuk be a peremfeltételek kezelését, koordináta transzformációt és szimmetriák kihasználásának lehetőségét.

A dolgozat kidolgozása során igyekszünk minél szemléletesebben és egyszerűbben ismertetni a különböző spektrális módszereket, hogy könnyen érthető legyen olyan egyetemi diákok számára is, akik korábban nem hallottak a spektrál módszerekről. Habár a spektrál módszerek meglehetősen kiforrottak és számos idegen nyelvű szakirodalom áll rendelkezésre, magyar nyelvű könyv még nem született a témában. A dolgozattal célunk az első magyar nyelvű egyetemi jegyzet alapjainak lefektetése, melyet a későbbiekben további példákkal és megoldandó problémákkal egészítünk ki.

1.2. Spektrál módszer történeti áttekintése

A differenciálegyenletek numerikus megoldásának egyik lehetséges módja a spektrál módszer. A módszer kulcsa a hely szerinti deriváltak minél pontosabb előállítás. Az ismert (kezdeti feltétel) vagy ismeretlen függvényt egy függvénysor segítségével közelítjük, mely alkalmasan megválasztott bázisfüggvények ϕ_n (polinomok, vagy harmonikus függvények) lineáris kombinációjából tevődik össze. Minden bázisfüggvény meg van szorozva egy hozzá tartozó együtthatóval a_n . Az így kapott függvény feladata a megoldás minél pontosabb közelítése. A pontos függvény és a közelítésül szolgáló függvénysor közötti különbség a reziduum. A célunk, hogy a differenciálegyenlet és a peremfeltételek a lehető legpontosabban ki legyenek elégítve, miközben a reziduum minimális. Ezt egy alkalmasan megválasztott súlyfüggvény segítségével érjük el, ezért a korai spektrál módszereket a szakirodalomban súlyozott maradékok módszerének („*weighted mean residual method*”) is nevezik (lásd: Finlayson és Scriven (1966)). A különböző spektrál módszerek a reziduum minimalizálásának módjában térnek el.

A fő jellegzetesség, ami megkülönbözteti a spektrál módszereket a véges elem, véges térfogat és véges differenciasémáktól az, hogy hogyan választjuk meg a bázisfüggvényeket. A klasszikus spektrál módszerek bázisfüggvényei az adott térrészen folytonosak, végtelenszer differenciálhatóak és közel ortogonálisak (kicsi a bázisfüggvények belső szorzataiból képzett mátrix sávzsélessége), vagyis globális jellegű megközelítést alkalmaz. Ezzel szemben, a véges elem, véges térfogat és véges differencia sémák esetén a teret felosztjuk kisebb elemekre, osztáspontokra és az osztáspontok környezetében alacsony fokszámú polinom segítségével közelítjük a megoldást. Ezek a bázisok lokális jellegűek csak egy adott pont környezetében vannak értelmezve (csak ott nem nulla), közel ortogonálisak, de nem végtelenszer differenciálhatóak.

A bázis-, illetve súlyfüggvény megválasztása szerint három korai spektrál módszert különböztetünk meg, név szerint: Galerkin, kollokáció és a tau módszer. A Galerkin módszer jellegzetessége, hogy a bázis- és a súlyfüggvények megegyeznek (lásd: Galerkin (1915)). A bázisfüggvények sima, végtelenszer differenciálható függvények és egyenként kielégítik a peremfeltételeket. Galerkin módszer esetén nem használunk osztáspontokat, hanem folytonos függvényekkel dolgozunk, és a belső szorzatokból képzett mátrixelemeket integrálással határozzuk meg. A meghatározandó ismeretlenek a bázisokhoz tartozó együttható értékek a különböző időszínteken. Kollokációs módszer esetén a teret a véges differencia sémákhoz hasonlóan felbontjuk, ekkor a súlyfüggvények a kollokációs pontonra központosított Dirac delta függvények. Ez a módszer biztosítja, hogy a differenciálegyenlet a kollokációs pontokban pontosan ki legyen elégítve. Az ismeretlenek a kollokációs (interpolációs) pontokban vett függvényértékek a kérdéses időpillanatokban. A tau módszer hasonló a Galerkin módszerhez, azonban egyik bázisfüggvénynek sem kell kielégítenie a

peremfeltételeket, ezért kiegészítő egyenletek szükségesek, melyek biztosítják a peremfeltételek kielégülését.

A kollokációs módszer először Slater (1934) és Kantorovic (1934) publikációjában jelent meg különleges alkalmazások kapcsán. Később Frazer et al. (1937) a közönséges differenciálegyenletek egyik általános megoldási módszerévé fejlesztette tovább, változatos bázisfüggvényeket és tetszőlegesen megválasztott kollokációs pontokat használtak. A kollokációs pontok eloszlásának, melyet egy adott bázisfüggvény rendszerhez választunk, döntő szerepe van abban, hogy milyen pontos megoldás érhető el, ezt Lanczos (1938) állapította meg, ezzel megteremtve az ortogonális kollokációs módszer alapjait. A megállapítást többen felhasználták kezdeti érték probléma megoldása során, bázisfüggvényként Chebyshev polinomokat választva például: Clenshaw (1957), Clenshaw és Norton (1963), Wright (1964). Villadsen és Stewart (1967) tovább fejlesztette a módszert, alkalmassá téve peremérték problémák megoldására.

A spektrál módszert térben periodikus problémák esetén Kreiss és Oliger (1972) és Orszag (1972) alkalmazta először parciális differenciálegyenlet megoldására. Előbbi Fourier -, utóbbi pszeudo-spektrál módszernek nevezte. Az első komolyabb probléma, ahol parciális differenciálegyenlet megoldására spektrál módszert használtak, Silberman (1954), aki Galerkin módszer segítségével végzett meteorológia modellezést. A Galerkin módszer egy módosított formája a tau módszer, melynek alkalmazásával nagy pontosságú eredményeket ért el Orszag (1971) áramlástanban lineáris stabilitás problémák megoldásában. Gottlieb és Orszag (1977) tanulmánya az első átfogó matematikai összegzés a spektrál módszer elméletéről mely lefedi a problémák széles választékát.

Az 1980-as évek második felétől egy új módszer vált egyre népszerűbbé. A Gauss kvadratura formulák segítségével a Galerkin módszerben szereplő integrálokat numerikusan közelítették. A Gauss kvadratura egy adott függvény integráljának közelítése bizonyos pontokban vett függvényértékek súlyozott összegével. A Gauss féle integrálás lényege, hogy a súlyokat és az abszcisszákat is mi választjuk. Ortogonális bázisrendszer esetén a Gauss kvadratura formulák segítségével az interpolációs pontok optimális eloszlása meghatározható (lásd Mercier (1981)). A kollokációs módszerhez hasonlóan az ismeretlenek a megoldás kvadratura pontokban vett értékei. A szakirodalom ezt a megközelítésmódot Galerkin módszer numerikus integrálással (G-NI) nevezi

Az 1980-as évek végére a spektrál módszerek váltak a lamináris – turbulens átmenet, és a turbulens áramlások kutatásának uralkodó numerikus eszközévé. Az ezt követő 10 év eredményes volt, számos könyv és cikk született a spektrál módszer elméleti fejlődéséről és gyakorlati felhasználhatóságáról. Az első megjelent könyv Canuto et al. (1988), mely a spektrál módszer áramlástanban történő alkalmazásait mutatja be. Boyd (1989, és 2001 második kiadás) nagy részletességgel és tanácsokkal ellátva írja le a spektrál algoritmusokat. Fornberg (1996) bemutatja a spektrál kollokációs módszer gyakorlati megvalósításának módját, mely tartalmaz példail-

lusztrációkat, megértést szolgáló magyarázatot, Fortan kód részleteket és tömör fejezeteket a tubulens áramlásokban és időjárás előrejelzésben történő alkalmazásról. Trefethen (2000) bevezető a spektrál kollokációs módszerbe, melybe bőséges Matlab példa is található. A spektrál módszert más területen is alkalmazták, például elsőrendű hiperbolikus problémákhoz (Tadmor (1998) és Gottlieb és Hesthaven (2001)), hullámegyenlet megoldásához (Cohen (2002)), és axiszimmetrikus problémákhoz (Bernardi et al. (1999)).

Az 1980-as évek végére a klasszikus spektrál módszer meglehetősen kidolgozottá vált, ezért a magasabb rendű módszerek összetett geometrián történő alkalmazását kezdték kutatni. Funaro (1997) a spektrál elemes módszert vizsgálta elliptikus peremérték probléma kapcsán, összetett geometriában, olyan áramlásban, ahol domináns a konvekció. Az első átfogó könyv a spektrál módszer összetett geometriában történő alkalmazásáról 2000 körül jelent meg. Karniadakis és Shrewin (1999) egységes rendszerbe foglalta a spektrál elem módszert, (lásd: Patera (1984)), és a „*h-p*” véges elem módszert („*h-p finite element method*”), mely a struktúrált és struktúrátlan térben történő alkalmazásra is mutat példát, mind összenyomható és összenyomhatatlan áramlás esetén. A véges elem módszereknél a megoldás pontosságának növelése három módszerrel lehetséges. A legegyszerűbb az elemszám növelése („*h – refinement*”), ekkor az osztáspontok közötti távolság h csökken, miközben a pontokra illesztett lokális polinom fokszáma p változatlan, ezt általában ott alkalmazzuk, ahol az áramlási jellemzők rohamosan változnak (pl.: nyíróréteg). A másik lehetséges módszer sima megoldás esetén, ha az elemszámot változatlanul hagyjuk, viszont az osztáspontokra illesztett polinom fokszámát növeljük („*p – refinement*”). A „*h-p*” véges elem módszer a kettő kombinációja, lásd: Babuška et al. (1981), Guo és Babuška (1986). Deville et al. (2002) magasabb rendű sémákat (kollokációs és spektrál-elemes módszer) használt összenyomhatatlan áramlások a fizikai térben történő megoldására. Schwab (1988) számos hasznos elméleti eredménnyel szolgál magasabb rendű polinommal történő közelítés tulajdonságairól összetett geometrián.

1.3. Áramlástechnikai alkalmazások

Ahogy a történelmi áttekintés során már említettük a spektrál módszerek az áramlástanban problémák egyik fő numerikus módszerévé váltak az 1980-as évek végére. A spektrál módszert az áramlástanban sikerrel alkalmazták a laminárisból turbulens áramlásba történő átmenet szimulációjához, a turbulens áramlások számításához, illetve örvényesség numerikus modellezéséhez, stabilitási problémákban, összenyomható és összenyomhatatlan áramlásokban is.

Az áramlások legegyszerűbb formája a lamináris (réteges) áramlás. A lamináris áramlásokban a sebességeloszlás szabályos, az egymás mellett áramló folyadékrétegek anyaga csak a molekuláris diffúzió miatt keveredik egymással. A lamináris áramlások lehetnek stabilak vagy instabilak. Stabil az áramlás, ha egy kis zavarás az

áramlásban csökken, instabil az áramlás, ha a zavarás növekszik. A legtöbb áramlás laminárisként indul, majd instabillá válik (térben vagy időben) míg végül az áramlás turbulenssé válik. A turbulens hosszlépték (turbulens örvény mérete) széles tartományban (2... 6 nagyságrend) változik. A legnagyobb lépték a geometriai tér méreteivel arányos. A legkisebb örvényméretet a molekuláris viszkozitás miatti disszipáció fejt ki hatását, a turbulens mozgási energia hővé alakul. A makroszkopikus hosszlépték L és a mikroszkopikus (legkisebb) hosszlépték, (Kolmogorov hosszlépték) η arányát az alábbi összefüggés fejezi ki:

$$\frac{L}{\eta} = \text{Re}^{3/4} \quad (1.1)$$

ahol: a Reynolds szám:

$$\text{Re} = \frac{uL}{\nu}, \quad (1.2)$$

ahol: ν a kinematikai viszkozitás és $u = (\overline{u'^2}/3)^{1/2}$, ahol u' az ingadozó sebesség komponens, a felülvonás pedig az időátlagolást jelöli. Azért, hogy minden léptéket leírjunk irányonként N db osztáspont szükséges (lásd: Canuto et al. (2006)):

$$N = c_1 \frac{L}{\eta}, \quad (1.3)$$

ahol a c_1 szorzó értéke az alkalmazott numerikus sémától függően választjuk.

A turbulens áramlások két egyszerű típusa a homogén és az izotróp turbulencia. Homogén turbulencia esetén az átlagolt áramlási jellemzők eltolástól függetlenek, azaz az x , y , és z irányban az ingadozó sebességkomponensek u' , v' és w' RMS („Root Mean Square”, pl.: $u_{RMS} = (\overline{u'^2})^{1/2}$) értékei állandóak a teljes számítási tartományon. Izotróp turbulens áramlásban az áramlási jellemzők a forgatásra invariánsak, azaz az átlagsebesség gradiens nulla, az ingadozó sebességkomponensek RMS értékei megegyeznek $u_{RMS} = v_{RMS} = w_{RMS}$ a teljes térrészen. Az izotróp turbulencia egyúttal homogén is.

Az (1.3) egyenletben lévő c_1 szorzó tényező értékét homogén turbulencia szimulációkhoz spektrál módszerrel körülbelül $c_1 = 2$, negyedrendű séma esetén $c_1 = 6$, másodrendű séma esetén $c_1 = 24$, kell választani azért, hogy 0,1% vagy annál nagyobb pontosságot érjünk el.

A makroszkopikus időlépték T és mikroszkopikus időlépték t arányát: $T/t = \sqrt{\text{Re}}$ fejezi ki. Ahhoz, hogy az áramlás egy jellemző periódusát leírjuk a szükséges időlépések száma:

$$N_{TS} = c_0 \sqrt{\text{Re}}. \quad (1.4)$$

A statisztikailag megbízható eredmény érdekében a szorzótényező c_0 100 és 1000 közötti érték, mely függ az időlépés algoritmusától és az időintervallumtól. Azért, hogy frissítsük a megoldást, a szükséges műveletek száma időlépésenként, olyan több lépéses sémák esetén, mint például Adams-Bashforth vagy Runge-Kutta (lásd: Canuto et al. (2006)):

$$c_2 N^3 \log_2 N + c_3 N^3, \quad (1.5)$$

ahol a szorzó tényezők spektrál módszer esetén $c_2 = 45$ és $c_3 = 35$, negyedrendű térbeli séma esetén $c_2 = 17$ és $c_3 = 120$, másodrendű térbeli séma alkalmazásával $c_2 = 17$ és $c_3 = 60$. Homogén turbulencia szimulációk során, a memóriakövetelmény durván arányos:

$$4c_1^3 \text{Re}^{9/4}, \quad (1.6)$$

és az összes művelet közelítőleg:

$$c_0 c_1 \text{Re}^{11/4} [c_2 \log_2 (c_1 \text{Re}^{3/4}) + c_3]. \quad (1.7)$$

A fentiek alapján megbecsülhető, hogy mekkora felbontás szükséges azért, hogy az áramlási szimulációt a turbulencia hossz- és időlépték teljes skáláján (turbulencia modell alkalmazása nélkül) numerikusan megoldjuk. Ezt a számítási eljárást direkt numerikus szimulációnak (DNS) nevezzük, a továbbiakban bemutatott példák többsége DNS szimulációval készült.

A spektrál módszerek egyik lényeges kérdése, hogy milyen bázisfüggvényeket használjuk. A későbbiekben ezt részletesebben tárgyaljuk, azonban a példák jobb érthetősége miatt fontos megemlíteni, hogy az alkalmazott bázisfüggvényeket a peremfeltételtől függően választjuk. Periodikus peremfeltételek esetén (pl.: határolatlan terek, szimmetriák) a legjobb választás a Fourier sor, nem periodikus peremfeltétel esetében (pl.: fallal határolt tér) pedig az estek többségében Chebyshev polinomok alkalmazása a célravezető.

Homogén 3 dimenziós turbulencia szimulációját végezte el összenyomhatatlan áramlásban Orszag és Patterson (1972), Fourier bázisokat és Galerkin megközelítést alkalmaztak, a számítást az akkoriban leggyorsabb szuperszámítógépen végezték. A számítási sebessége 1 MFlop volt (10^6 lebegőpontos művelet másodpercenként). $c_0 = 500$ tipikus értéke mellett $N = 32$ csomóponttal minden irányban az (1.7) egyenlet alapján a számítás 10 óra alatt készült el $\text{Re} = 45$ esetén. A számítástechnika fejlődésével a számítási sebességek nőttek, a leggyorsabb szuperszámítógép sebessége 2000 körül 1 TFlop volt (10^{12} lebegőpontos művelet másodpercenként) ezzel a számítás ideje $\text{Re} = 3000$ esetén 10 óra, $\text{Re} = 40000$ esetén körülbelül 4 hónap. Izotróp turbulencia szimulációt végzett $\text{Re} = 16135$ mellett Kaneda és Ishihara (2006) az Earth Simulator-on (a világ leggyorsabb szuperszámítógépe akkoriban) Fourier spektrál algoritmust használva, 4096^3 db osztásponttal rendelkező hálón. A számítási sebesség 16 TFlop volt, így az (1.7) egyenlet alapján, a konstansok tipikus értékeivel számolva a szimuláció ideje 3,5 órára adódik.

A spektrál módszer egyedülálló sikere abban rejlik, hogy az azonos pontossággal bíró véges differencia sémák sokkal nagyobb erőforrást igényelnek. Negyedrendű véges differencia séma esetén az időlépések száma egy 10-es faktorral több, a szükséges memória pedig egy 20-as faktorral nagyobb. Másodrendű séma esetén pedig 3 nagyságrenddel több erőforrás szükséges. A homogén turbulencia elméleti megfontolásai alapján (eltolásra invariáns) a spektrál módszer bázisfüggvényeinek Fourier függvények használhatók. Ezzel növelhető a számítási hatékonyság, továbbá megvan az az előnye, hogy segítségével megállapíthatók a nemlineáris kölcsönhatások, amik hozzájárulnak a rezonancia jelenségek kialakulásához, energia átadáshoz, diszzipációhoz, és más dinamikai jellegzetességekhez. A spektrál módszer megengedi a szimmetriák kihasználását is. Ezek az előnyök hatékonyabb módszerek kidolgozását inspirálták.

Rogallo (1977) kidolgozott egy transzformációt, ami lehetővé teszi a Fourier spektrál módszer alkalmazását homogén turbulens áramlásban. Blaisdel et al. (1993) ezt bővítették ki kompresszibilis esetre. Homogén, kompresszibilis turbulencia szimulációt végeztek Fourier kollokációs módszerrel egyenletes nyírás esetén 192^3 osztásponttal rendelkező hálón. Olyan problémák esetén ahol szilárd perem van a számítási tartomány határán, a spektrál módszer alkalmazása nehezebb, mivel nem lehet tisztán Fourier módszert használni az ilyen esetekben. Megbízható eljárás az 1970-es évek végéig nem volt. Az első megbízható Fourier-Chebyshev spektrál algoritmust Orszag és Kells (1980), és Kleiser és Schumann (1980) alkalmazott egyszerű fallal határolt áramlásban. A legfontosabb előnye a spektrál módszernek a véges differencia módszerrel szemben, hogy minimális a fáziskésése. Ez különösen fontos az instabilitás, és turbulenciába történő átmenet szimulációja során, mivel az ilyen szimulációkat hullámok megjelenése és nemlineáris kölcsönhatások követnek több karakterisztikus perióduson keresztül. A fázishiba kumulatív, ezért a periódusonkénti hibák összeadódnak. Az olyan módszer, ami akár pár százalék fázishibát megenged periódusonként hibás végeredményt ad.

Kleiser és Schumann (1984) párhuzamos síklapok közötti áramlásra dolgozott ki egy módszert, mely két Fourier irányt és egy Chebyshev irányt alkalmaz. Ezt az algoritmust használta később Gilbert és Kleiser (1990) az első teljes laminárisból turbulens áramlásba történő átmenet szimulációjához, fallal határolt áramlási térben, 128^3 elemű hálón. Kim et al. (1987) egy másik széles körben elterjedt eljárást dolgozott ki síklapok közti áramlásra. Rogers és Moser (1992) a módszer adaptációját alkalmazta szabad nyírórétegben. A két homogén irányban Fourier sort, a harmadik irányban Jacobi polinomokat használva. Scotti és Piomelli (2001) pulzáló csatornaáramlásban Large-Eddy szimulációhoz alkalmazott spektrális módszert 68^3 elemű hálón. A kis elemszám lehetővé teszi a széles paramétertartományon történő alkalmazást. A paramétertanulmánnyal a pulzáló áramlás részletes fizikája jellemezhető.

A spektrál módszerek a sajátérték problémák megoldásában is kitűnnek. A Chebyshev spektrál módszer erősségét sajátérték problémák diszkretizáláshoz Orszag (1971) mutatja be, lineáris stabilitás vizsgálat kapcsán, ami számos újabb ku-

tatót inspirált a spektrál módszer alkalmazására, inkompresszibilis és kompresszibilis problémák megoldásához egyaránt. Erre példa Theofilis (2000), aki két Chebyshev és egy Fourier irányt alkalmazott nagyléptékű sajátérték problémához.

1.4. Egy egyszerű példa

Az irodalmi áttekintésen keresztül láttuk, hogy a spektrál módszer legfőbb előnye, hogy sokkal nagyobb pontosság érhető el vele, kisebb számítási igény mellett, mint differenciasémák alkalmazásával. A fejezetben a spektrál módszer ezen előnyét demonstráljuk egy egyszerű hővezetési példán keresztül. A hővezetési egyenlet a matematikában jól ismert parciális differenciálegyenlet, mely analitikusan megoldható. Az analitikus megoldást tekintjük a legpontosabbnak, ehhez tudjuk viszonyítani a numerikus módszerekkel kapott eredményeket.

Tekintsük a hővezetési egyenletet egyenes, állandó keresztmetszetű homogén anyagú rúd esetén. Az x tengely a rúd hossza mentén helyezkedjen el, $x_0 = 0$ és $x_L = L$ jelölje a rúd két végét. A hővezetés differenciál egyenlete 1 dimenzióban (lásd: Boyce (2002)):

$$\alpha^2 u_{xx} = u_t, \quad 0 < x < L, \quad t > 0, \quad (1.8)$$

ahol u_{xx} a hőmérséklet x (hely koordináta) szerinti második deriváltját, u_t a hőmérséklet idő szerinti első deriváltját jelöli. Az α a hőmérsékletvezetési tényező, mely konstans, csak a rúd anyagától függ:

$$\alpha = \sqrt{\frac{\lambda}{\rho \cdot c}}, \quad (1.9)$$

ahol λ a hővezetési tényező, ρ a sűrűség, c a fajhő. Feltételezzük, hogy a kezdeti hőmérséklet eloszlást ismerjük a rúdban:

$$u(x,0) = f(x), \quad 0 \leq x \leq L, \quad (1.10)$$

ahol $f(x)$ ismert függvény. Homogén peremfeltételt írunk elő; a rúd végein a hőmérséklet $T_0 = T_L = 0$. A megoldandó hővezetési probléma tehát:

$$u_t = \alpha^2 u_{xx}, \quad u(x,0) = f(x), \quad T_0 = T_L = 0, \quad t > 0, \quad \alpha = \sqrt{\lambda/(\rho \cdot c)}. \quad (1.11)$$

A következő fejezetekben bemutatjuk az analitikus megoldást, a másodrendű véges differencia sémás megoldást, és az egyik korai spektrál módszerrel, a Galerkin módszerrel történő megoldás menetét. Majd összevetjük a különböző megoldási módszerrel a kapott eredményeket, és a megoldások pontosságát.

1.4.1. HŐVEZETÉS ANALITIKUS MEGOLDÁSA

A hővezetési egyenlet analitikus megoldása a változók szétválasztásával történik. A levezetést lásd Boyce (2012) 10. fejezetében. A differenciálegyenlet megoldása az alábbi végtelen függvénytörzs:

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin \frac{n\pi x}{L} \cdot e^{-n^2 \pi^2 \alpha^2 t / L^2}. \quad (1.12)$$

Az így kapott megoldásnak ki kell elégíteni a kezdeti hőmérséklet eloszlást ($t=0$):

$$u(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin \frac{n\pi x}{L} = f(x), \quad (1.13)$$

ez az $f(x)$ függvény szinuszos Fourier sora, melynek együtthatói:

$$a_n = \frac{2}{L} \cdot \int_0^L f(x) \sin \left(\frac{n\pi x}{L} \right) dx = 0 \quad n = 1, 2, \dots \infty. \quad (1.14)$$

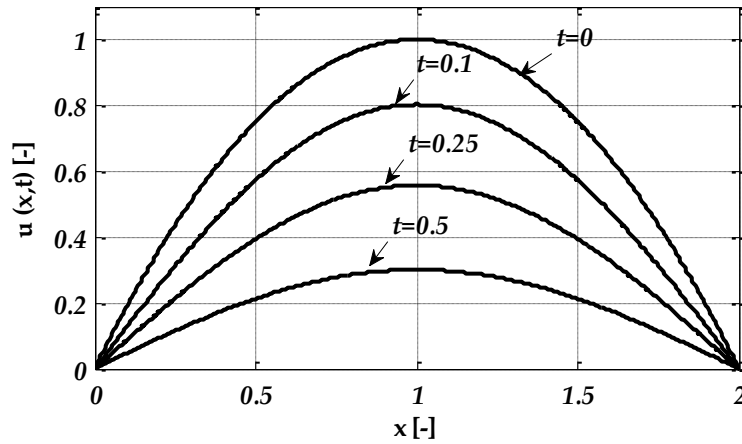
Ha a rúd hossza $L = 2$, a hőmérsékletvezetési tényező $\alpha = 1$ dimenziótlan mennyiségek, és a kezdeti hőmérséklet eloszlás $f(x) = 1 - (x-1)^2$, akkor az együtthatók az alábbi módon számolhatók:

$$a_n = \int_0^2 (1 - (x-1)^2) \cdot \sin \frac{n\pi x}{2} dx = -\frac{8}{n^3 \pi^3} [-2 + 2 \cos(n\pi) + n\pi \cdot \sin(n\pi)]. \quad (1.15)$$

Az integrálás elvégzésével az a_n együtthatóra analitikus összefüggést kaptunk. Ezt helyettesítjük az (1.12) egyenletbe. A gyakorlatban végtelen tagot nem lehet végtelen tagot venni, ezért N tag után levágjuk, így a hővezetési probléma megoldása az alábbi:

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^N -\frac{8}{n^3 \pi^3} [-2 + 2 \cos(n\pi) + n\pi \cdot \sin(n\pi)] \cdot e^{-\frac{n^2 \pi^2}{L^2} t}. \quad (1.16)$$

Az analitikus módszerrel kapott megoldás az 1.1. ábrán látható különböző időpontokban, $N=1000$ esetére. Ez már nagy pontosságú megoldást eredmény, mint azt látni fogjuk.



1.1. ábra: A hővezetési egyenlet analitikus megoldása különböző időpontokban, $N=1000$.

1.4.2. MÁSODRENDŰ VÉGES DIFFERENCIA MÓDSZER

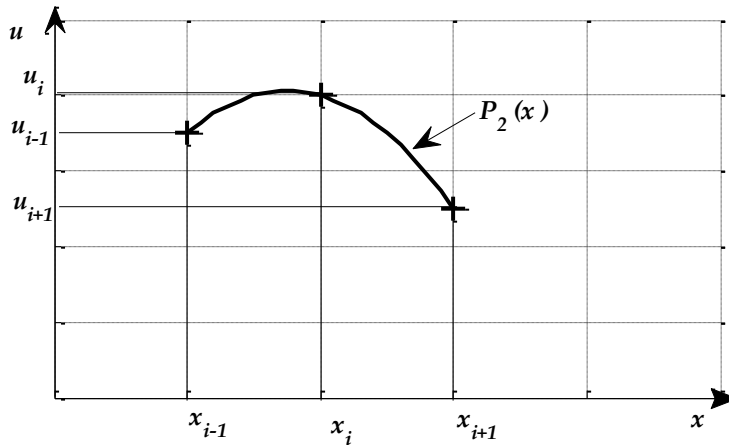
Véges differencia módszer esetén nem a folytonos $u(x,t)$ függvénnyel, hanem a függvény x_i osztáspontokban vett értékeivel $u(x_i,t)=u_i(t)$ dolgozunk. A jelölt osztáspontok és a pontokban vett függvény értékek felírhatók vektoriális formában:

$$\begin{aligned}\underline{x}^T &= (x_0, x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_N), \\ \underline{u}^T(t) &= (u_0(t), u_1(t), \dots, u_i(t), \dots, u_N(t)),\end{aligned}\quad (1.17)$$

ahol $x_0=0$ és $x_N=L$. A következőkben az explicit időfüggés jelölését elhagyjuk, de $u(x_i)=u_i$ továbbra is időfüggő.

A feladat, hogy meghatározzuk a függvény numerikus térbeli deriváltját. Ennek egyik legáltalánosabb módja, hogy a függvényt tetszőleges x_i osztáspont környezetében $P_N(x)$ polinommal közelítünk. Tekintsük a háló 3 egymást követő pontját: x_{i-1} , x_i , x_{i+1} , a hozzájuk tartozó függvényértékek rendre u_{i-1} , u_i , u_{i+1} . Erre a három pontra egyetlen egy másodrendű polinom illeszthető, ahogy az 1.2. ábrán is látható:

$$P_2^i(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2. \quad (1.18)$$



1.2. ábra: Másodfokú polinom illesztése három pontra

Az osztáspontokban vett függvényértékek kifejezhetők a közelítő polinom segítségével:

$$u_{i-1} = a_0 + a_1x_{i-1} + a_2x_{i-1}^2. \quad (1.19)$$

$$u_i = a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2. \quad (1.20)$$

$$u_{i+1} = a_0 + a_1x_{i+1} + a_2x_{i+1}^2. \quad (1.21)$$

Mivel u_i az adott x_i osztáspontokban ismert, a közelítő polinom együtthatói $\{a_0, a_1, a_2\}$ az (1.19), (1.20), (1.21) egyenletekből kifejezhetők, vagyis az együtthatók a helykoordinátáktól és az osztáspontokban vett függvényértékektől függenek: $\{a_n\} = f(u_{i-1}, u_i, u_{i+1}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$.

A függvény deriváltja az x_i helyen kifejezhető a pontokra illesztett közelítő polinom segítségével:

$$u'_i = a_1 + 2a_2x_i. \quad (1.22)$$

Ahol $'$ a hely koordináta szerinti deriváltat jelöli. Mivel az együtthatók csak a hálópontok koordinátájától és a pontokban vett függvényértékektől függenek az (1.22) egyenlet átalakítható az alábbi formába:

$$u'_i = A \cdot u_{i-1} + B \cdot u_i + C \cdot u_{i+1}. \quad (1.23)$$

Ahol A, B, C együtthatók az alábbiak (lásd: Hegedűs et al. (2013)):

$$A = \frac{x_{i+1} - x_i}{(x_i - x_{i-1}) \cdot (x_{i-1} - x_{i+1})}, \quad (1.24)$$

$$B = \frac{x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}}{(x_i - x_{i-1}) \cdot (x_i - x_{i+1})}, \quad (1.25)$$

$$C = \frac{x_i - x_{i-1}}{(x_i - x_{i+1}) \cdot (x_{i-1} - x_{i+1})}. \quad (1.26)$$

Az első és utolsó pontban, hogy tartsuk a másodrendű pontosságot, egy kis módosítás történik:

$$u'_0 = A^0 \cdot u_0 + B^0 \cdot u_1 + C^0 \cdot u_2. \quad (1.27)$$

$$u'_N = A^N \cdot u_{N-2} + B^N \cdot u_{N-1} + C^N \cdot u_N. \quad (1.28)$$

Az együtthatók a nulladik pontban:

$$A^0 = \frac{x_1 - 2x_0 + x_2}{(x_1 - x_0) \cdot (x_0 - x_2)}. \quad (1.29)$$

$$B^0 = \frac{x_0 - x_2}{(x_1 - x_0) \cdot (x_1 - x_2)} \quad (1.30)$$

$$C^0 = \frac{x_1 - x_0}{(x_1 - x_2) \cdot (x_2 - x_1)}. \quad (1.31)$$

Az együtthatók az utolsó pontban:

$$A^N = \frac{x_{N-1} - x_N}{(x_{N-1} - x_{N-2}) \cdot (x_{N-2} - x_N)}. \quad (1.32)$$

$$B^N = \frac{x_N - x_{N-2}}{(x_{N-1} - x_{N-2}) \cdot (x_{N-1} - x_N)}. \quad (1.33)$$

$$C^N = \frac{x_{N-2} - 2x_N + x_{N-1}}{(x_{N-1} - x_N) \cdot (x_N - x_{N-2})}. \quad (1.34)$$

A függvény derivált vektoriális alakja: $\underline{u}'^T = (u'_0, u'_1, u'_2, \dots, u'_i, \dots, u'_N)$, így a hely szerinti deriválás egy mátrix-vektorszorzássá egyszerűsödik, ami az alábbi formában írható:

$$\underline{u}' = \underline{\underline{D}} \cdot \underline{u}. \quad (1.35)$$

Ahol: $\underline{\underline{D}}$ az állandó együtthatós differenciáló mátrix, mely a fentebbi felírt együtthatókból épül fel:

$$\begin{bmatrix} u'_0 \\ u'_1 \\ u'_2 \\ \vdots \\ u'_i \\ \vdots \\ u'_{N-1} \\ u'_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A^0 & B^0 & C^0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A & B & C & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A & B & C & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & A & B & C & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A & B & C \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A^N & B^N & C^N \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_i \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{bmatrix}. \quad (1.36)$$

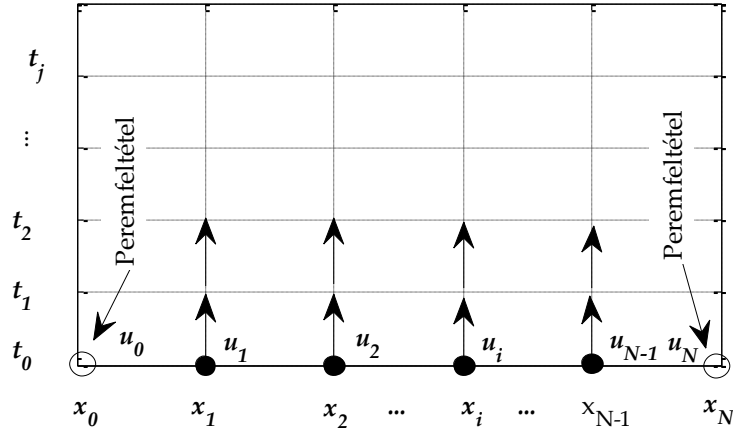
Összesen $N + 1$ db egyenletet kaptunk, tehát a szabadságfokok száma („*Degrees of Freedom*”) az osztópontok számával egyezik meg $DoF = N + 1$. A módszer erőssége, hogy a parciális differenciálegyenletekben, mint például jelen hővezetési probléma is, a hely szerinti deriválás egy alkalmas mátrixszorzássá egyszerűsödik, melyet szoftveres környezetben könnyű kezelni. A $\underline{\underline{D}}$ deriváló mátrix első és utolsó sorait törölni kell így a belső pontokra $N - 1$ db közönséges differenciálegyenlet adódik. Ezzel a feladatot kezdeti érték problémára vezettük vissza. Azonban azért, hogy az u'_i , $i = 1, 2, \dots, N - 1$ elemeket meghatározzuk, elő kell állítanunk a teljes $\underline{u}$ vektort, minden időszinten. Az belső pontokban u_i , $i = 1, 2, \dots, N - 1$ a függvényértékek a közönséges differenciálegyenlet megoldásaként kiadódnak, két szélső pontban pedig a peremfeltételből határozható meg u_0 és u_N értéke az újabb időszinten.

Alkalmazása a következő: adottak az első és utolsó pontban a peremfeltételek: $T_0(t)$ és $T_N(t)$ valamint az $u(x, 0) = f(x)$ kezdeti hőmérséklet eloszlás. Először diszkretizálunk, a számítási tartományt egyenként Δx részekre bontjuk, így előállnak az x_i pontok, $i = 0, 1, 2, \dots, N$. Ezzel a $\underline{\underline{D}}$ differenciáló mátrix elemei számolhatóak, valamint a nulládik időpontban a diszkrét függvényértékek u_i beleértve a peremfeltételeket is. A következő lépéseket ciklusba rendezzük:

1. Előállítjuk az idő szerinti deriváltat az (1.8) egyenlet alapján a deriváló mátrix segítségével: $\underline{\dot{u}} = \underline{\underline{D}}^2 \cdot \underline{u}$, ahol α -t egységnyiinek választottuk. Az idő szerinti derivált $\underline{\dot{u}}^T = (\dot{u}_1, \dot{u}_2, \dots, \dot{u}_i, \dots, \dot{u}_{N-1})$ első és utolsó elemét elhagyjuk, ezekben a pontokban a hőmérsékletértékeket a peremfeltételekből határozzuk majd meg. Így összesen $N - 1$ db közönséges differenciálegyenletet kapunk a közbenső osztáspontokra. Az újabb időpillanatban elő kell állítanunk $\underline{u}$ minden elemét.
2. A belső osztáspontokba u_i , $i = 1, 2, \dots, N - 1$ a hőmérséklet eloszlást az újabb időszinten t_j egy közönséges differenciálegyenlet megoldó algoritmus segítségével (pl.: Runge – Kutta) határozzuk meg.

3. Az új időszinten behelyettesítjük a peremfeltételeket $u_0 = T_0(t_j)$ és $u_N = T_N(t_j)$ így az $\underline{u}$ összes eleme előáll j -dik időpillanatban.

Az 1-3 lépést ismételve meghatározható a hőmérséklet eloszlás a további időszinten, a megoldási módszert a 1.3. ábra szemlélteti.



1.3. ábra: A másodrendű véges differencia módszer szemléltetése hővezetési példa esetén.

A hővezetési probléma másodrendű centrális differenciasémával történő megoldására Matlab kódrészlet olvasható az Appendix D.1. fejezetében.

1.4.3. GALERKIN MÓDSZER, LEGKISEBB NÉGYZETEK MÓDSZERE

A spektrál módszerek és a véges differenciasémák közti leglényegesebb különbség, hogy a véges differencia sémák a keresett függvényt lokálisan az osztáspontokra illesztett polinomok segítségével közelítik, ezzel szemben a spektrál módszerek a függvényt globálisan illesztett polinommal vagy harmonikus függvénnyel közelítik. Egy tetszőleges $f(x)$ függvény térbeli közelítése alkalmasan megválasztott bázisfüggvények lineáris kombinációjából tevődik össze (lásd: Boyd (2001)):

$$f(x) \approx P_N(x) = \sum_{n=0}^N a_n \phi_n(x), \quad (1.37)$$

ahol a_n az együtthatókat, $\phi_n(x)$ a bázisfüggvényeket jelöli. A reziduum függvény:

$$R(x, a_0, a_1, \dots, a_N) = P_N(x) - f(x). \quad (1.38)$$

Egzakt megoldás esetén a reziduum függvény $R(x, a_n)$ pontosan nulla. Célunk az ismert vagy ismeretlen függvény minél pontosabb közelítése, úgy hogy a reziduumot csökkentjük. A feladat tehát, hogy úgy válasszuk meg a bázisfüggvényeket és az együtthatókat, hogy a reziduum minimális legyen. Az analitikus megoldás is egy speciális spektrál módszernek fogható fel.

A különböző spektrál módszerek a minimalizálás módjában különböznek. A legtöbb minimalizáló módszer besorolható, a súlyozott maradékok módszerének

(„method of mean weighted residual” – MWR) családjába (lásd: Finlayson (1973)). Ha a bázisfüggvények $\phi_n(x)$ kielégítik a peremfeltételeket, akkor az együttthatók meghatározhatók egy megfelelően megválasztott súlyfüggvényt w_m bevezetve:

$$\langle w_m, R(x, a_0, a_1 \dots a_N) \rangle \equiv 0. \quad (1.39)$$

ahol $\langle \cdot, \cdot \rangle$ a belső szorzatot jelöli. Ezt a lineáris algebrában (vektorok skalár szorzatának analógiájára) ortogonális projekciónak is nevezik, lásd: Appendix: A.1.2 és A.1.3 fejezete.

Ha adottak két $[a, b]$ intervallumon folytonos $f(x)$ $g(x)$ tetszőleges függvények, és adott nem negatív súlyfüggvény $\rho(x)$, akkor definíció szerint a belső szorzat folytonos függvényekre, az alábbi formában írható:

$$\langle f, g \rangle_F \equiv \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) dx. \quad (1.40)$$

Megjegyzendő, hogy a két súlyfüggvény nem azonos! w_m az a függvény melyre végezzük a projekciót (vetítést), míg $\rho(x)$ biztosítja, a két függvény ortogonalitását $[a, b]$ intervallumon. Galerkin módszer esetén az (1.39) egyenletbe szereplő súlyfüggvények megegyeznek a bázisfüggvényekkel.

$$w_m = \phi_m \quad m = 0, 1, \dots, N. \quad (1.41)$$

Az (1.38) és (1.41) egyenleteket az (1.39) egyenletbe helyettesítve, és a belső szorzat tulajdonságait (lásd: Appendix A.1.1 fejezet (A.8) összefüggések) kihasználva:

$$\langle \phi_m, R \rangle_F = \langle \phi_m, P_N - f \rangle_F = \langle \phi_m, P_N \rangle_F - \langle \phi_m, f \rangle_F = 0. \quad (1.42)$$

Az (1.42) egyenletbe (1.37) kifejezést helyettesítve, majd rendezve az alábbi egyenletet kapjuk:

$$\langle \phi_m, f \rangle_F = \sum_{n=0}^N a_n \langle \phi_n, \phi_m \rangle_F \quad m = 0, 1, \dots, N. \quad (1.43)$$

Jelölje $f_{F,m} = \langle \phi_m, f \rangle$ az $\underline{f}$ oszlopvektor és $\Phi_{F,nm} = \langle \phi_n, \phi_m \rangle$ a $\underline{\Phi}$ $N+1 \times N+1$ mátrix elemeit. Így az (1.43) az alábbi mátrixegyenletté átírható:

$$\underline{f}_F = \underline{\Phi}_F \cdot \underline{a}. \quad (1.44)$$

Mátrix alakban írva:

$$\begin{bmatrix} \langle \phi_0, f \rangle_F \\ \langle \phi_1, f \rangle_F \\ \vdots \\ \langle \phi_m, f \rangle_F \\ \vdots \\ \langle \phi_N, f \rangle_F \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \phi_0, \phi_0 \rangle_F & \langle \phi_1, \phi_0 \rangle_F & \cdots & \langle \phi_n, \phi_0 \rangle_F & \cdots & \langle \phi_N, \phi_0 \rangle_F \\ \langle \phi_0, \phi_1 \rangle_F & \langle \phi_1, \phi_1 \rangle_F & \cdots & \langle \phi_n, \phi_1 \rangle_F & \cdots & \langle \phi_N, \phi_1 \rangle_F \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \langle \phi_0, \phi_m \rangle_F & \langle \phi_1, \phi_m \rangle_F & \cdots & \langle \phi_n, \phi_m \rangle_F & \cdots & \langle \phi_N, \phi_m \rangle_F \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \langle \phi_0, \phi_N \rangle_F & \langle \phi_1, \phi_N \rangle_F & \cdots & \langle \phi_n, \phi_N \rangle_F & \cdots & \langle \phi_N, \phi_N \rangle_F \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} \quad (1.45)$$

Innen a spektrális együtthatók meghatározhatóak:

$$\underline{a} = \underline{\Phi}_F^{-1} \cdot \underline{f}_F \quad (1.46)$$

A hővezetési egyenletben (1.8) az ismeretlen függvény, melyet közelítünk a hőmérséklet eloszlás $u = f$. Behelyettesítve az (1.37) egyenletbe, ha α egységnyi, a fentebbi levezetés alapján az alábbi egyenlet adódik:

$$\underline{f}_{F,t} = \underline{f}_{F,xx} \quad (1.47)$$

Mivel a bázisfüggvények csak helytől függenek, az együtthatók pedig csak időtől az egyenlet tovább írható az (1.44) alapján az alábbi formában:

$$\underline{\Phi}_F \cdot \dot{\underline{a}} = \underline{\Phi}_{F,xx} \cdot \underline{a} \quad (1.48)$$

Innen a spektrális együtthatók idő szerinti deriváltjai kifejezhetők:

$$\dot{\underline{a}} = \underline{\Phi}_F^{-1} \cdot \underline{\Phi}_{F,xx} \cdot \underline{a} = \underline{\Phi}_F^* \cdot \underline{a} \quad (1.49)$$

Ezzel kezdeti érték problémára vezettük vissza a feladatot. Ha a közelítő polinom fokszáma N , akkor $N+1$ db közönséges differenciálegyenletet kapunk az a_n $n=0.1...N$ együtthatókra. A szabadsági fokok száma a megoldandó közönséges differenciálegyenletek számával egyezik meg, $DoF = N+1$.

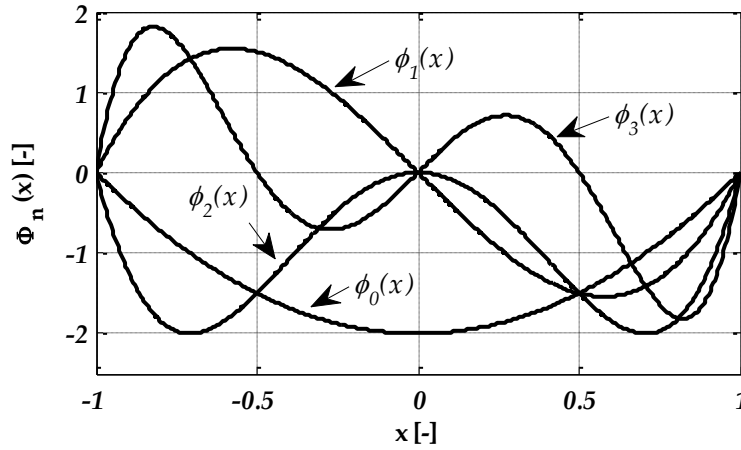
Először bázisfüggvényeket választunk, melyek egyenként kielégítik a peremfeltételeket. A bázisfüggvények alapján az $\underline{\Phi}_F^*$ mátrix előállítható. A kezdeti időpillanatban ismert a hőmérséklet eloszlás (kezdeti feltétel), így az együtthatók $\underline{a}$ és az együtthatók idő szerinti első deriváltjai $\dot{\underline{a}}$ a kezdeti időpillanatban meghatározhatók. Ebből számolható a következő időpillanatban a bázisok együtthatói. Az együtthatókat az (1.37) közelítő függvénybe helyettesítve előáll a hőmérséklet eloszlás az újabb időszinten. Egy közönséges differenciálegyenlet megoldó algoritmust használva a teljes időtartomány végig számolható.

A számítások MATLAB környezetben történtek ODE45 közönséges differenciálegyenlet megoldóval. Kódrészlet az Appendix D.2 fejezetében található.

Galerkin módszer akkor alkalmazható, ha a peremfeltételeket a bázisfüggvények egyenként kielégítik. Ezért az alábbi módon választunk bázisfüggvényeket, (lásd: (Boyd 2001)):

$$\begin{cases} \phi_{2n}(x) = T_{2n}(x) - 1 & n = 1, 2, \dots \\ \phi_{2n+1}(x) = T_{2n+1}(x) - x & n = 1, 2, \dots \end{cases} \quad (1.50)$$

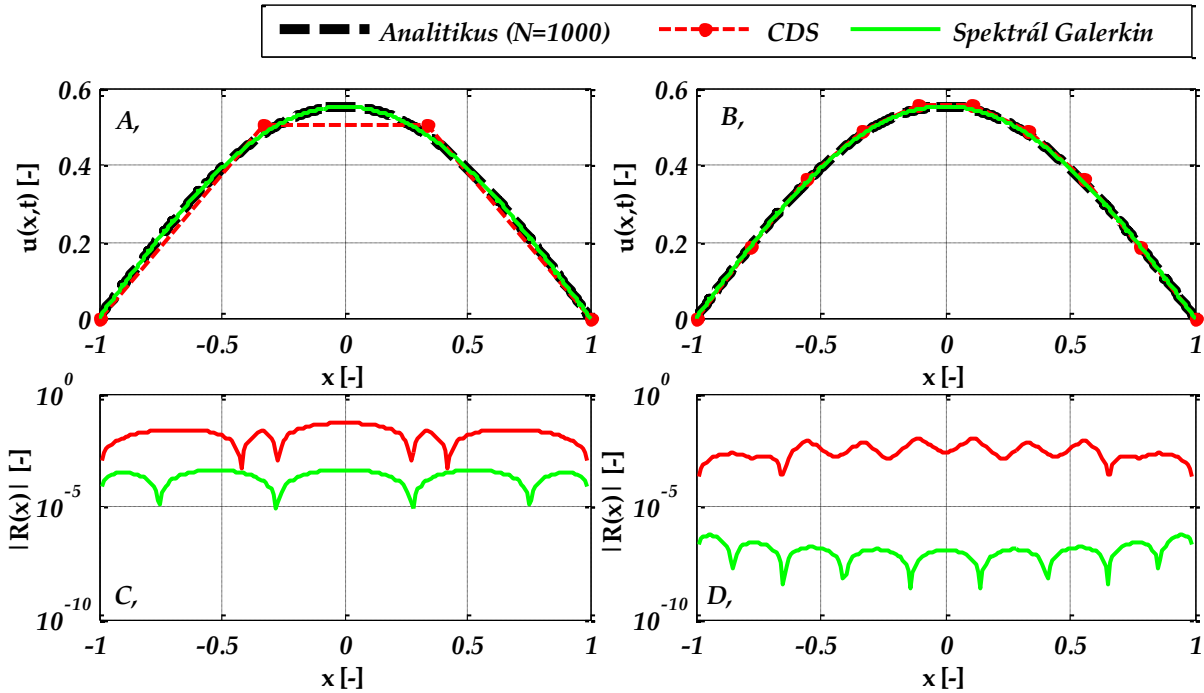
ahol $T_n(x)$ a Chebyshev polinomok. Az így képzett bázisokra igaz, hogy $\phi_n(\pm 1) = 0$ bármely n esetén. A keresett függvényünket $u(x, t)$ átskalázzuk a $[0, L]$ intervallumról, a $[-1, 1]$ intervallumra, így a peremfeltételek kielégülnek. A kapott bázisfüggvényeket az 1.4. ábrán látjuk $DoF = 4$ szabadságfok esetén.



1.4. ábra: A Galerkin módszerben alkalmazott bázisfüggvények $DoF=4$ esetén

1.4.4. KÖVETKEZTETÉSEK ÉS KÉRDÉSEK

A különböző megoldási módszerekkel kapott eredményeket $t = 0.25$ időpillanatban hasonlítjuk össze. Az 1.5. ábrán láthatóak a kapott eredmények, az A, diagramon 4, a B, diagramon pedig 10 szabadsági fok esetén.

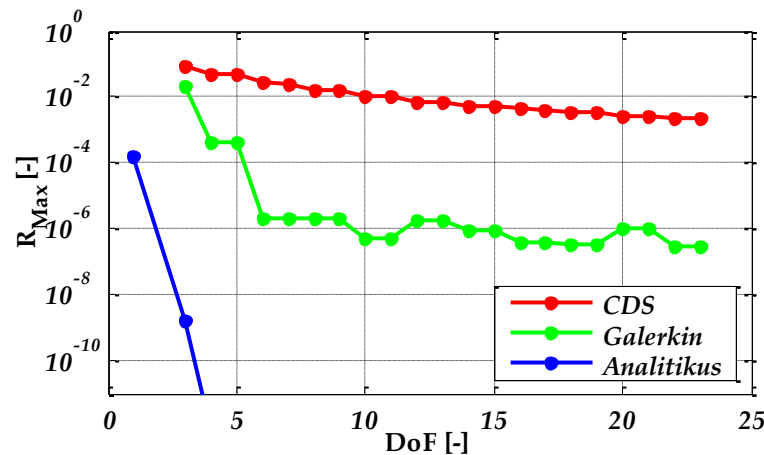


1.5. ábra: A különböző megoldási módszerekkel kapott eredmények összehasonlítása $t=0.25$ időpillanatban. A, diagramon a másodrendű véges differencia séma (piros) és a spektrál Galerkin (zöld) megoldások egyaránt $DoF=4$, szabadság fok mellett készültek, míg a B, ábrán $DoF=10$ volt. A C, és D, ábrán az $N=1000$ tagból álló analitikus (fekete) megoldástól való eltérések abszolút értékei láthatóak.

Az analitikus megoldást $N=1000$ taggal közelítjük, ezt tekintjük a pontos megoldásnak. A C, és D, diagramon a másodrendű centrális differencia sémával (piros) és a

Galerkin módszerrel (zöld) kapott megoldások analitikustól (pontos) való eltérésének abszolút értékét ábrázoltuk logaritmikus skálán. A diagramok alapján elmondható hogy a spektrális módszer pontossága nagyságrendekkel jobb, mint a hasonló szabadsági fokkal rendelkező másodrendű centrális differencia sémás megoldásnak.

Különböző szabadsági fokok mellett kapott hiba (reziduum) abszolút maximum értékeit is ábrázoltuk, ami az 1.6. ábrán látható. Ez alapján szintén arra a következtetésre jutunk, hogy a spektrál módszer gyorsabban konvergál és nagyobb pontosság érhető el vele, mint centrális sémával. Míg a Galerkin módszerrel $DoF = 10$ mellett már 10^{-6} nagyságrendű a maximális hiba, addig ugyanilyen szabadság fok mellett a centrális séma csak 10^{-2} nagyságrendet éri el. Az ábrán kézzel az analitikus megoldás konvergencia sebessége is fel van tüntetve. Látható, hogy kevés tagot véve is nagy pontosságot eredményez egy ilyen egyszerű példa esetén is.

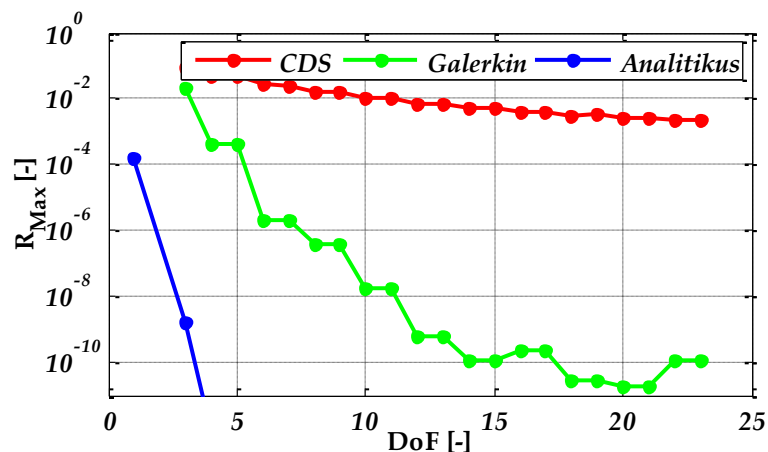


1.6. ábra: A másodrendű véges differencia sémás (piros) és a Galerkin (zöld) megoldási módszerrel kapott eredmények maximális hibája a szabadság fok függvényében az ismertett hővezetési probléma esetén $t=0.25$ időpillanatban, ha az ODE megoldó relatív hibája $1e-3$, abszolút hibája $1e-6$ nagyságrendű (ODE45 alap beállításai)

A Galerkin (zöld) konvergencia sebesség ábráján megfigyelhető, hogy a szabadsági fok növelésével a hiba nem csökken 10^{-6} nagyságrend alá. Ennek oka, hogy a számításhoz a MATLAB beépített közönséges differenciálegyenlet megoldóját (ODE 45) használtuk alapbeállítások mellett, ekkor a relatív 10^{-3} az abszolút tolerancia pedig 10^{-6} . A közönséges differenciálegyenlet megoldó toleranciáját növelve 10^{-12} -re újra elvégeztük a számítást (Centrális és Galerkin sémára egyaránt). Az így kapott konvergencia sebességek 1.7. ábrán láthatók. A diagram hasonló a korábbihoz, a spektrál módszer konvergencia sebessége lényegesen gyorsabb, mint a másodrendű centrális differenciasémáé, viszont reziduum így $DoF = 14$ esetén már eléri a 10^{-12} nagyságrendet.

Mindkét ábrán megfigyelhető a zöld görbének a lépcsőzetessége, azaz csak minden második szabadsági fok növelés eredményez nagyobb pontosságot. Ennek oka, hogy a parciális differenciálegyenlet megoldása szimmetrikus így csak a szimmetrikus bázisokhoz tartozó együtthatók nem nullák. Látható, hogy elegendő lenne csak ezeket

az együtthatókat vizsgálni és a szimmetriának nem eleget tevő bázisokat elhagyni. A szükséges bázisok (ezzel együtt a megoldandó közönséges differenciálegyenletek száma) felére csökkenthető. A szimmetriák kihasználásának lehetőségéről a 2.4. fejezetben olvashatunk részletesebben.



1.7. ábra: A másodrendű véges differencia séma (piros) és a Galerkin (zöld) megoldási módszerrel kapott eredmények maximális hibája a szabadsági fok függvényében az ismertett hővezetési probléma esetén $t=0.25$ időpillanatban, ha az ODE megoldó relatív és abszolút hibáját $1e-12$ nagyságrendűnek vesszük fel

A spektrál módszerek kapcsán gyakran felmerülnek az alábbi kérdések:

- 1.) Sokkal nehezebb-e programozni, mint a véges differencia vagy véges elem kódokat?

Nem nehezebb, ahogy ezt később látni is fogjuk, pszeudo-spektrál módszereknél a hely szerinti deriváltat a centrális sémához hasonlóan egy úgynevezett deriváló mátrixszal történő szorzással állítjuk elő, és az osztáspontokra kapott differenciálegyenlet megoldásával kapjuk meg az eredményt. Az ilyen kódok írása nem bonyolultabb, mint a véges differencia illetve véges elem kódoké. Egyedüli nehézséget a klasszikus spektrál módszerek, mint például a Galerkin módszer okozhat, mivel itt a belső szorzatokat integrálással számoljuk és az együtthatókra kapunk differenciálegyenlet rendszert.

- 2.) A valós mérnöki életben valóban szükség van-e nagy sok tizedes jegy pontosságra, ami a spektrál módszerekkel elérhető?

A hosszú időtartamú hidrodinamikai integrálokat és a turbulens áramlásba történő átmenetet gyakran tönkretesz a számítási instabilitás. Gyakori megoldás, hogy megőrizzük a stabilitást, hogy sok disszipációt vezetünk be, vagy energia-megőrző differencia vagy véges elemes sémákat alkalmazunk. Mindkét módszer torzítja a megoldást ezért nagy pontosságú megoldás nem érhető el mesterséges csillapítással vagy explicit felírt energia megmaradással. A spektrál módszerek a nagy pontosság miatt gyakran stabilak csillapítás és bevezetett energia megmaradás nélkül is.

3.) A spektrál módszer csak akkor hasznos, amikor nagy pontosságra van szükség?

Nem, mivel memória takarékos módszer. 3 dimenzióban durván 1/8-ad annyi szabadsági fok szükséges, hogy 1% pontossággal vagy azon belül megoldjuk áramlási problémákat, mint amennyi másod illetve negyedrendű differencia séma esetén szükséges lenne ugyanilyen pontosság eléréséhez

4.) A spektrál módszer alkalmas-e lökeshullám vagy hullámfronti áramlások esetén?

Igen, azonban a spektrál módszerek nincsenek annyira kifinomultak részabva az ilyen típusú problémákra, mint néhány alacsonyrendű véges differencia vagy véges elem módszer. Azonban nagy előrelépések történtek annak érdekében, hogy ezeket az elméleteket spektrál módszerekre is átdolgozzák. Ilyen problémák esetén a függvényben szakadások lehetnek melyek közelében a közelítő függvény oszcillálni kezd. Az oszcilláció csökkentésére léteznek simítási technikák melyekről Canuto et al. (2006) olvashatunk. Hasonló szakadással rendelkező probléma (Burgers egyenlet) megoldásáról, Basdevant et al. (1986) és Augenbaum (1989) folyóiratcikkében olvashatunk.

2. SPEKTRÁL MÓDSZER MATEMATIKA HÁTTERE

Most, hogy összehasonlítottuk a spektrál módszert a másodrendű véges differencia sémával és az analitikus megoldással az egyszerű hővezetési példán keresztül, a különböző megoldási módszerekkel, visszatérhetünk a spektrál módszer alapjainak mélyebb megértéséhez. A spektrál módszerek két átfogó kategóriába sorolhatóak: interpolációs, vagy nem interpolációs módszerek.

Az interpolációs, vagy más néven pszeudó spektrál módszer az interpolációs pontokban vett függvényértékekre egy polinomot illeszt. $N + 1$ db osztáspontra pontosan 1 db N -ed fokú polinom illeszthető. A módszer lényege, hogy az illesztett polinom minél jobban közelítse a keresett függvényt. Az interpoláció definíció szerint megköveteli, hogy az illesztett polinom értékei $P_N(x)$ az osztáspontokban megegyezzenek az ismert $f(x)$ függvény értékeivel $P_N(x_i) \equiv f(x_i)$. Másképpen megfogalmazva, a reziduum az osztáspontonban definíció szerint nulla kell, hogy legyen:

$$R(x_i, a_0, a_1 \dots a_N) \equiv 0 \quad i = 0, 1 \dots N \quad (2.1)$$

Mivel a reziduum az interpolációs pontokban nulla, a differenciálegyenlet pontosan ki van elégítve az interpolációs, vagy más néven kollokációs pontokban. Feltételezhetően, ahogy nő a rácspontok száma, a reziduum csökken, egyre kisebb és kisebb lesz a kollokációs pontok közötti hézagban, annyira hogy $R \approx \Delta x$ az egész tartományon, tehát $P_N(x)$ az N növelésével egyre jobban konvergál az $f(x)$ függvényhez. Van azonban kivétel, amikor pusztán a foksám növelésével nem lesz pontosabb az eredmény, erre később mutatunk példát.

Történelmileg a nem interpolációs módszereket fedezték fel hamarabb. A nem interpolációs módszerek családjába tartoznak a klasszikus spektrál módszerek például a Galerkin és a tau módszer. Itt nincsenek rácspontok, ehelyett az ismert $f(x)$ függvényt skalárisan szorozzuk adott bázisfüggvényekkel és integrálunk, ahogy azt már az 1.4.3. fejezetben láthattuk. Az interpolációs és nem interpolációs módszerek közötti különbségre csábító lehet úgy tekintenünk, mint „integrálás kontra interpoláció”, ez azonban túlságosan leegyszerűsített elgondolás. Számos könyv, mint például Fox és Parker (1968) megmutatja, hogyan lehet a bázisfüggvények bizonyos tulajdonságait kihasználva meghatározni az együtthatókat anélkül, hogy integrálnánk; és ennek ellenére a végeredmény azonos azzal, mint amit az integrálás elvégzésével kapnánk. Megtévesztő lenne integrációs módszernek nevezni, mikor előfordulhat, hogy egyáltalán nem kell integrálást végezni, ezért maradunk a nem interpolációs módszer elnevezés használatánál.

Az együtthatók meghatározásának módjában, nincs egyértelmű kapcsolat a pszeudó-spektrál és a súlyozott integrálokat használó módszerek között. Ráadásul az interpolációs pontok megválasztása is az egyik új feladatunk. Szerencsére, minden egyes gyakori bázis függvény rendszerhez tartozik egy természetes eloszlása az interpolációs pontoknak. Ezek az interpolációs pontok, a Galerkin módszerben szerep-

lő integrálok Gauss-kvadrátúra pontjai. A pszeudó-spektrál módszer ekvivalens a spektrál módszerrel, ha az integrálást numerikusan a Gauss kvadrátúrák segítségével közelítjük az $N + 1$ db interpolációs pontban, ezért nevezzük az interpolációs módszert gyakran pszeudó spektrál módszernek is.

Annak ellenére, hogy az interpolációs módszerek jóval egyszerűbbek programozás szempontjából, valamint nagyobb a számítási hatékonyság, vannak azonban olyan területek, ahol mégis a Galerkin módszer az előnyösebb. A Galerkin módszert nehezebb programozni, mint a pszeudó-spektrál algoritmusokat. Ennek egyszerű a magyarázata, a pszeudó spektrál módszernél a kvadrátúrák segítségével becsüljük az integrált, ami mátrixszorzásra vezethető vissza, ezt numerikusan könnyű elvégezni. Galerkin módszernél integrálnunk kell, ami nehezebb. A Galerkin módszerrel N -ed fokú közelítéssel ugyanolyan pontosság érhető el, mint pszeudó-spektrál módszerek esetén $N + 1$, vagy $N + 2$ fokú közelítő függvények sor által. Ha az N fokszám nagy, a különbség elhanyagolható, viszont kis fokszám esetén az extra egy – két szabadságfok jelentős lehet.

Kis fokszám esetén papírt és ceruzát ragadva, egyszerű problémák számítógép nélkül is megoldhatók, ha a mátrix elemei analitikusan integrálhatóak. Ezért a klasszikus spektrál módszer nem csak numerikus, hanem elméleti eszköz is lehet. Galerkin módszert alkalmaznak a szférikus harmonikus időjárás előrejelzésekhez és a klíma modellekben, mivel az ilyen problémákhoz gyorsabb, mint a pszeudó spektrál módszer. A kvantum kémia területén is széles körben a Galerkin módszer az elterjedt. Az összetett molekulák olyan nagyszámú szabadságfokot igényelnek, hogy a számítások csak számítógéppel végezhetők. Rá vagyunk kényszerítve, hogy kevés bázisfüggvényt használjunk elektrononként, ezért a szimuláció is alacsonyrendű, még akkor is, ha a szabadságfokok száma $DoF = 400!$ Ezért a Galerkin módszer extra pontossága nagyon fontos ilyen esetekben. Nagy felbontású, numerikus számításokhoz viszont a pszeudó spektrál módszer hatékonyabb.

Egy fontos kérdés még tisztázatlan: Milyen $\phi_n(x)$ bázisfüggvény rendszert választunk? Azt szeretnénk, hogy a bázisfüggvényeink: könnyen számíthatóak legyenek, gyorsan konvergáljanak, és a bázisfüggvény rendszer teljes legyen, ami azt jelenti, hogy bármely megoldás ábrázolható tetszőlegesen nagy pontossággal N fokszámot elegendően nagynak választva.

Azt, hogy milyen bázisfüggvényeket használjunk, a geometria határozza meg. Térben periodikus problémák esetén a közönséges Fourier sor a legjobb választás. Nem periodikus problémák megoldásához pedig az esetek 95%-ban Chebyshev polinomok alkalmazása a legcélravezetőbb. A Chebyshev polinomokat $T_n(x)$ gyakran önálló bázisfüggvény rendszerként kezeljük, mivel x -ben polinom, viszont az alábbi rekurziós összefüggés alapján (lásd: Boyd(2001):

$$T_n(\cos \theta) \equiv \cos(n\theta), \quad (2.2)$$

látható, hogy a Chebyshev rendszer valójában egy koszinusz Fourier sor változócserével.

Léteznek azonban kivételek: egy gömbfelszínen sokkal hatékonyabbak a szférikus harmonikus függvények, fél végtelen terek esetén Laguerre függvények, végtelen tereken pedig Hermite, Rational Chebyshev vagy Sinc függvényeket célszerű alkalmazni.

A dolgozat további részében részletesen áttekintjük a pszeudó spektrális módszerek matematikai hátterét és az alkalmazási módját, különböző 1 dimenziós problémák esetében. A legáltalánosabban használatos bázisokra a Chebyshev polinomra illetve a Fourier sorra koncentrálnak.

2.1. Interpoláció, pszeudó spektrál módszer

A pszeudó spektrál módszerek és a klasszikus spektrál Galerkin módszer szorosan összefüggenek egymással. Azért, hogy ezt belássuk és megértsük a pszeudó spektrál algoritmusok működését, át kell tekintünk néhány klasszikus numerikus módszert a megértés érdekében: a polinomiális interpolációt, a legkisebb négyzetek módszerét diszkrét esetben, a Gauss integrálást, és az ortogonális bázisok fogalmát.

2.1.1. POLINOMIÁLIS INTERPOLÁCIÓ

Az interpoláció egy olyan közelítő módszer, ahol a keresett $f(x)$ függvény nem ismert értékei az ismert értékek (interpolációs pontokban vett függvényérték) $f(x_i)$ alapján becsülhetők. Ez az interpolációs pontokra illesztett polinom függvény segítségével történik. $N + 1$ db pontra, pontosan egy db N fokú polinom illeszthető. Az illesztett függvénynek definíció szerint át kell haladnia az interpolációs pontokon, ezért az illesztett polinom és a keresett függvény értékei az interpolációs pontokban megegyeznek:

$$f(x_i) \equiv P_N(x_i) \quad i = 0, 1, \dots, N. \quad (2.3)$$

A pszeudó spektrál módszerek célja az ismert (kezdeti időpillanatban), vagy ismeretlen $f(x)$ függvény, és a függvény deriváltjainak minél pontosabb közelítése az interpolációs pontokra illesztett $P_N(x)$ polinom segítségével:

$$\begin{aligned} f(x) &\equiv P_N(x) = \sum_{n=0}^N a_n \phi_n(x), \\ f_x(x) &\equiv P_{N,x}(x) = \sum_{n=0}^N a_n \phi_{n,x}(x), \\ f_{xx}(x) &\equiv P_{N,xx}(x) = \sum_{n=0}^N a_n \phi_{n,xx}(x). \end{aligned} \quad (2.4)$$

ahol: $\phi_n(x)$, bázisfüggvény, legegyszerűbb esetben n -ed fokú polinom $\phi_n(x) = x^n$ és a_n az n -dik bázisfüggvény együtthatója, az alsó index az x szerinti deriválást jelöli.

Az i -dik interpolációs pontban vett függvényérték az alábbi formában írható:

$$f(x_i) \equiv P_N(x_i) = \sum_{n=0}^N a_n \phi_n(x_i). \quad (2.5)$$

A fenti összefüggést az összes pontra felírva az alábbi mátrix egyenletet kapjuk:

$$\underline{f} = \underline{\phi} \cdot \underline{a}. \quad (2.6)$$

Mátrix alakban:

$$\begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_N) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_0(x_0) & \phi_0(x_1) & \cdots & \phi_0(x_N) \\ \phi_1(x_0) & \phi_1(x_1) & \cdots & \phi_1(x_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \phi_N(x_0) & \phi_N(x_1) & \cdots & \phi_N(x_N) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

innen az együtthatók kifejezhetőek:

$$\underline{a} = \underline{\phi}^{-1} \cdot \underline{f}. \quad (2.8)$$

Az együtthatókat a (2.4) egyenletekbe helyettesítve az interpolációs pontokra illesztett polinomot (és deriváltjait) meghatároztuk. Így a közelítő polinom ismert.

2.1.2. DISZKRÉT LEGKISEBB NÉGYZETEK MÓDSZERE

A legkisebb négyzetek módszere diszkrét esetben a folytonoshoz analóg módon vezethető le. Ahogy már a Galerkin módszer bemutatásánál is ismertettük, folytonos esetben a belső szorzat az alábbi módon definiálható:

$$\langle \phi_n, \phi_m \rangle_F \equiv \int_a^b \rho(x) \cdot \phi_n(x) \cdot \phi_m(x) dx, \quad (2.9)$$

ahol: $\rho(x)$ a súlyfüggvény, $\phi_n(x)$ és $\phi_m(x)$ az $[a, b]$ intervallumon folytonos két tetszőleges bázisfüggvény. Diszkrét esetben a belső szorzat definíció szerint a két vektor skaláris szorzataként értelmezhető:

$$\langle \phi_n, \phi_m \rangle_D \equiv \sum_{i=0}^N w_i \cdot \phi_n(x_i) \cdot \phi_m(x_i), \quad (2.10)$$

ahol: w_i az i -dik pontban vett súly, melyet mi határozunk meg a későbbiekben, $\phi_n^T = [\phi_n(x_0), \phi_n(x_1) \dots \phi_n(x_N)]$ és $\phi_m^T = [\phi_m(x_0), \phi_m(x_1) \dots \phi_m(x_N)]$ a bázisfüggvények x_i osztáspontjaiban vett értékeit tartalmazó vektorok, ahol $n, m = 0, 1, \dots, N$.

A feladatunk most is az együtthatók meghatározása, úgy hogy eközben a reziduum minimalizálására törekszünk:

$$R(x_i) = f(x_i) - P_N(x_i) \quad i = 0, 1, \dots, N. \quad (2.11)$$

A reziduumot skalárisan szorozzuk egy súlyfüggvénnyel, mely a Galerkin módszerhez hasonlóan most is megegyezik a bázisfüggvénnyel. Az így kapott belső szorzatokat egyenlővé tesszük nullával, azaz ortogonális projekciót alkalmazunk. (A leve-

zetések matematikai háttérét (belső szorzat, ortogonalitás ortogonális projekció) lásd az Appendix A.1.1, A.1.2, és A.1.3 fejezetében.):

$$\langle \phi_m, R(x_i) \rangle \equiv 0 \quad m = 0, 1, \dots, N. \quad (2.12)$$

Így az alábbi egyenletrendszert kapjuk:

$$\langle \phi_m, f \rangle_D = \langle \phi_m, P_N \rangle_D. \quad (2.13)$$

A behelyettesítés után:

$$\langle \phi_m, f \rangle_D = \sum_{n=0}^N a_n \langle \phi_n, \phi_m \rangle_D, \quad (2.14)$$

ami felírható mátrixegyenletként az alábbi formában:

$$\underline{f}_D = \underline{\Phi}_D \cdot \underline{a}, \quad (2.15)$$

mely mátrix alakban írva:

$$\begin{bmatrix} \langle \phi_0, f \rangle_D \\ \langle \phi_1, f \rangle_D \\ \vdots \\ \langle \phi_m, f \rangle_D \\ \vdots \\ \langle \phi_N, f \rangle_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \phi_0, \phi_0 \rangle_D & \langle \phi_1, \phi_0 \rangle_D & \cdots & \langle \phi_n, \phi_0 \rangle_D & \cdots & \langle \phi_N, \phi_0 \rangle_D \\ \langle \phi_0, \phi_1 \rangle_D & \langle \phi_1, \phi_1 \rangle_D & \cdots & \langle \phi_n, \phi_1 \rangle_D & \cdots & \langle \phi_N, \phi_1 \rangle_D \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \langle \phi_0, \phi_m \rangle_D & \langle \phi_1, \phi_m \rangle_D & \cdots & \langle \phi_n, \phi_m \rangle_D & \cdots & \langle \phi_N, \phi_m \rangle_D \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \langle \phi_0, \phi_N \rangle_D & \langle \phi_1, \phi_N \rangle_D & \cdots & \langle \phi_n, \phi_N \rangle_D & \cdots & \langle \phi_N, \phi_N \rangle_D \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

innen az együtthatók meghatározhatóak:

$$\underline{a} = \underline{\Phi}_D^{-1} \cdot \underline{f}_D. \quad (2.17)$$

Ez a levezetés csupán annyiban különbözik a Galerkin módszertől, hogy az $\underline{f}_D$ vektor és a $\underline{\Phi}_D$ mátrix elemeit integrálás helyett, két vektor súlyozott skaláris szorzataként határozzuk meg.

A legkisebb négyzetek módszere diszkrét esetben ekvivalens a polinom interpolációs módszer, azaz (2.8) és (2.17) egyenlet által leírtak azonosak, az általuk meghatározott együtthatók megegyeznek. Ez belátható, ha a (2.7) mátrixegyenlet minden sorát megszorozzuk $w_i \cdot \phi_m(x_i)$ -vel:

$$\begin{bmatrix} w_0 \cdot \phi_m(x_0) \cdot f(x_0) \\ w_1 \cdot \phi_m(x_1) \cdot f(x_1) \\ \vdots \\ w_N \cdot \phi_m(x_N) \cdot f(x_N) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_0(x_0) & \phi_1(x_1) & \cdots & \phi_N(x_N) \\ \phi_1(x_0) & \phi_1(x_1) & \cdots & \phi_1(x_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \phi_N(x_0) & \phi_N(x_1) & \cdots & \phi_N(x_N) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \cdot w_0 \cdot \phi_m(x_0) \cdot \\ a_1 \cdot w_1 \cdot \phi_m(x_1) \cdot \\ \vdots \\ a_N \cdot w_N \cdot \phi_m(x_N) \cdot \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

A szorzás után kapott mátrix egy sora egyszerűbb alakban az alábbi formában írható:

$$w_i \cdot \phi_m(x_i) \cdot f(x_i) = \sum_{n=0}^N a_n \cdot w_i \cdot \phi_n(x_i) \cdot \phi_m(x_i). \quad (2.19)$$

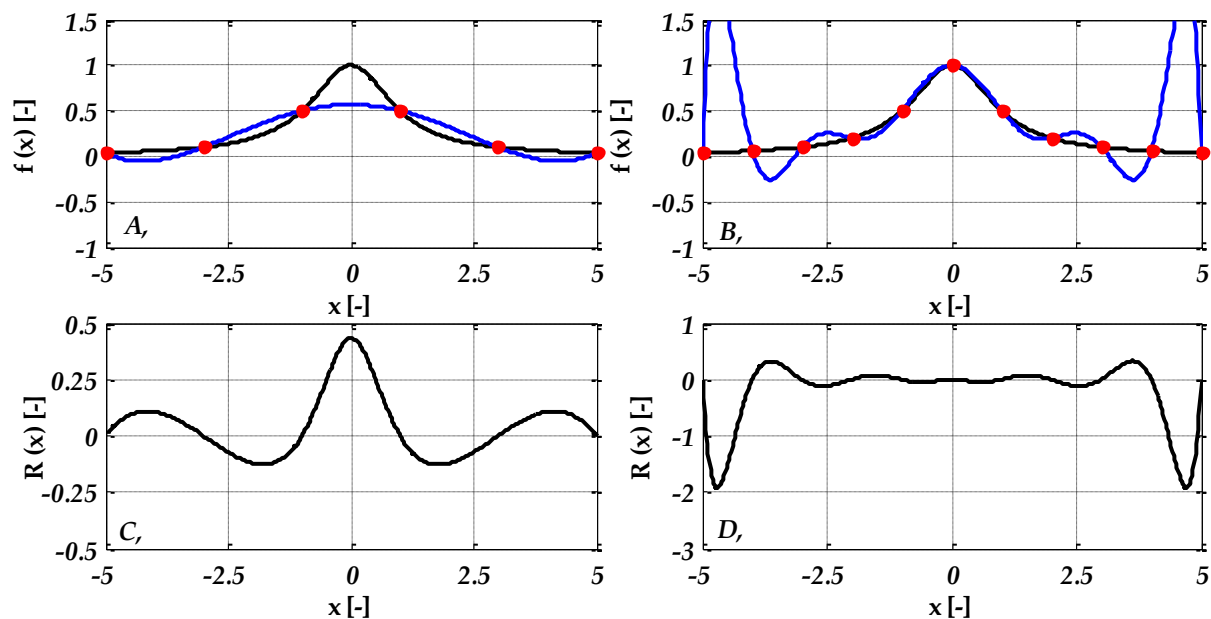
A mátrix sorait összegezzük:

$$\sum_{i=0}^N w_i \cdot \phi_m(x_i) \cdot f(x_i) = \sum_{n=0}^N a_n \cdot \left(\sum_{i=0}^N w_i \cdot \phi_n(x_i) \cdot \phi_m(x_i) \right). \quad (2.20)$$

A (2.20) egyenlet bal oldala és a zárójelen belül lévő tag az $\langle \phi_m, f \rangle_D$ és a $\langle \phi_n, \phi_m \rangle_D$ belső szorzatnak felel meg. Ezzel visszakaptuk a (2.14) egyenletet. Mivel $m = 0, 1, \dots, N$ ezért a teljes (2.15) mátrixegyenlet felírható. Ezzel bizonyítottuk, hogy a polinom interpoláció és a diszkrét legkisebb négyzetek módszere ekvivalens egymással.

2.1.3. STABILITÁSI PROBLÉMÁK

Az interpolációs pontok megválasztása nem triviális. Azt gondolhatnánk, hogy az osztáspontokat egyenközüen felvéve az $[a, b]$ intervallumon, a hiba csökken, ha az interpolációs pontok száma növekszik, bármilyen sima $f(x)$ függvény esetén. Ez azonban nem teljesen igaz. Instabilitási problémák fordulhatnak elő az osztópontok egyenközü eloszlása esetén. Léteznek olyan függvények, ahol a tartomány szélein az interpolált függvény oszcillálni kezd magas fokszámú polinommal történő közelítés esetén, ezt a matematikában Runge - jelenségnek hívják.



2.1. ábra: A Runge – jelenség személtetése a (2.21) egyenlet alapján különböző rendű polinomokkal történő közelítés esetén. Az A, és B diagramon az ismert függvény $f(x)$ (fekete) és az interpolációs függvény $P_N(x)$ (kék) látható. A piros pontok az interpolációs pontokat jelöljük. A, esetben 6db ($N=5$), B, esetben 11 db ($N=10$) osztóponttra illesztett interpolációs függvényt ábrázoltuk. A C, és D, diagramon az ismert és az interpolációs függvény közötti eltérés, reziduum látható.

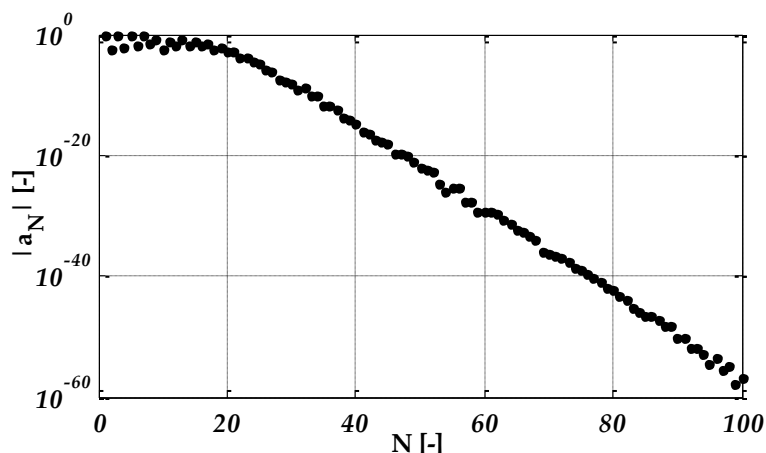
Az osztáspontok számának növelésével a tartomány belső részén csökken a hiba, viszont a tartomány szélein a hiba rohamosan nő. Ez egy fontos megállapítás abból a

szempontból, hogy a pontosság növelése érdekében nem elegendő csupán a pontok számát növelni. A jelenséget az alábbi példa alapján szemléltetjük:

$$f(x) = \frac{1}{1+x^2} \quad -5 \leq x \leq 5. \quad (2.21)$$

Az $f(x)$ függvényt és a közelítő polinomot szemlélteti a 2.1. ábra, ami alapján látható, hogy a pontok számának növelésével a tartomány közepén javult a közelítés pontossága, viszont a széleken nőtt a hiba. A helyzet azonban nem reménytelen, ha megfontoljuk a nem egyenközű háló használatát. Azt látjuk, hogy a tartomány közepével nincs gond, a nagy hibák a széleken vannak. Ebből arra következtethetünk, hogy középen a pontokat viszonylag távol is elhelyezhetjük egymástól, a tartomány szélein pedig sűríteni kell. Egy fontos megválaszolendő kérdés, hogy milyen a pontok optimális eloszlása? Erre a Gauss integrálás segít választ adni, ahogy ezt a 2.2. fejezetben fogjuk részletesen bemutatni.

A polinomiális interpoláció másik hátránya, hogy nagy felbontás esetén az x^N nagy fokú hatványai szerepelnek az interpolációs függvényben. A nagy fokszámú bázisokhoz nagyon kis együttható értékek tartoznak, ahogy ez a 2.2. ábrán is látható. Az együtthatók abszolút értékei széles nagyságrendben változnak, ezt a numerikus számábrázolási pontatlanságot okoz, így nagy fokszám esetén a klasszikus interpolációs módszer alkalmazása nem célravezető.



2.2. ábra: Az N -dik bázisfüggvényhez tartozó együtthatók abszolút értékei a (2.21) egyenlet polinomiális közelítése esetén.

A továbbiakban arra keressük a választ, hogy milyen az interpolációs (kollokációs) pontok optimális eloszlása, amivel el tudjuk kerülni a vizsgált tartomány szélein jelentkező oszcilláció miatti hibát, illetve hogyan tudjuk csökkenteni a nagy szabadságfokú problémák során a számábrázolási pontosságból adódó hibát alkalmasan megválasztott bázisfüggvényekkel.

2.2. Galerkin módszer numerikus integrálással

A kollokációs (interpolációs) módszereket azért nevezik pszeudó spektrál módszernek is, mert az interpolációs pontok optimális megválasztása a kollokációs módszert egyenértékűvé teszi a Galerkin módszerrel. A belső szorzatot Gauss féle numerikus integrálással számoljuk és ortogonális bázisfüggvény rendszert használunk.

2.2.1. NUMERIKUS INTEGRÁLÁS

A numerikus integrálás és a polinom interpoláció szorosan összefügg, hiszen egy kézenfekvő módszer az integrálásra, hogy az integrálandó $f(x)$ függvényt polinommal közelítünk, majd a polinomot $P_N(x)$ integráljuk. Az illesztett polinom a Lagrange féle bázisfüggvényekkel is felírható:

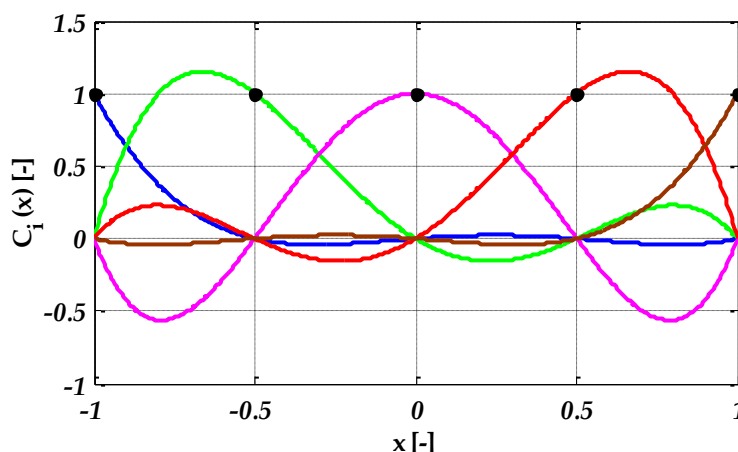
$$P_N(x) = \sum_{i=0}^N f(x_i) \cdot C_i(x). \quad (2.22)$$

Fontos megjegyezni, hogy ugyanarra az $N + 1$ db pontra pontosan egy darab polinom illeszthető, így a (2.22) egyenletben felírt $P_N(x)$ ugyanaz az illesztett függvény, mint az előző két esetben, csak egy speciális bázisfüggvény rendszer segítségével felírva. Az egyenletben szereplő $C_i(x)$ a Lagrange féle karakterisztikus bázisfüggvény, amely az alábbi formában írható:

$$C_i(x) \equiv \prod_{j=0; j \neq i}^N \frac{x - x_j}{x_i - x_j}. \quad (2.23)$$

Az i -dik interpolációs pontban a függvény 1-et ad eredményül, a többi pontban pedig nullát 0-át:

$$C_i(x_j) = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}. \quad (2.24)$$



2.3. ábra: Az $x_i = [-1; -0.5; 0; 0.5; 1]$ interpolációs pontokra illesztett Lagrange féle bázisfüggvények szemléltetése: $x_0 = -1$ a kék, $x_1 = -0.5$ a zöld, $x_2 = 0$ lila, $x_3 = 0.5$ piros, $x_4 = 1$ a barna függvény tartozik. Feketével az interpolációs pontokat jelöltük $C_i(x_j) = 1; i = j$.

Ezt szemlélteti a 2.3. ábra, melyen a $[-1, 1]$ intervallumon 5 db egyenközzűen felvett osztópontra illesztett Lagrange függvények láthatóak. Az integrál értékét tehát úgy kapjuk, hogy az illesztett polinomot integráljuk:

$$\int_a^b f(x)dx \cong \int_a^b P_N(x)dx = \int_a^b \sum_{i=0}^N f(x_i) \cdot C_i(x)dx = \sum_{i=0}^N w_i f(x_i). \quad (2.25)$$

Ahol w_i akvadratúra súlyok:

$$w_i = \int_a^b C_i(x)dx. \quad (2.26)$$

Mivel polinomot pontosan tudunk integrálni, az integrálás hibája az interpoláció hibájával arányos. Az interpoláció hibáját a Cauchy féle interpolációs hiba tétel alapján az alábbi formában írhatjuk fel (lásd: Boyd (2001)):

Tétel: Legyen $f(x)$ -nek legalább $N+1$ db deriváltja az $[a, b]$ intervallumon és legyen $P_N(x)$ az N fokú Lagrange féle interpolált függvény, akkor:

$$f(x) - P_N(x) = \frac{1}{[N+1]!} f^{(N+1)}(\xi) \prod_{i=0}^N (x - x_i), \quad (2.27)$$

valamennyi $\xi \in [a, b]$ -re.

Az interpoláció hibáját szeretnénk minimalizálni. Belátható a (2.27) egyenlet alapján, hogy az $f^{(N+1)}(\xi)$ tagot nem tudjuk befolyásolni, mivel ez csak a közelített függvénytől függő tényező, viszont a polinomiális tényező $\prod_{i=0}^N (x - x_i)$ nagysága az osztáspontok számától és azok eloszlásától függ, melyet mi választhatunk meg. A kérdés tehát az, hogy az osztáspontok milyen eloszlása esetén lesz a legkisebb ez a tag. Azért, hogy meghatározzuk az osztáspontok optimális eloszlását, előbb be kell vezetnünk az ortogonális bázisrendszer fogalmát.

2.2.1.1. Ortogonalitás

Egy bázisfüggvény rendszer ortogonális $[a, b]$ intervallumon, ha a belső szorzataikra (folytonos és diszkrét esetben egyaránt) igaz hogy:

$$\langle \phi_n, \phi_m \rangle = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ \nu_n & n = m \end{cases} \quad (2.28)$$

Tekintsük újra a legkisebb négyzetek módszerével levezetett mátrix egyenletet. Ortogonális bázisok esetén csak a mátrix főátlójában maradnak elemek, a többi elem nulla.

$$\begin{bmatrix} \langle \phi_0, f \rangle \\ \langle \phi_1, f \rangle \\ \vdots \\ \langle \phi_m, f \rangle \\ \vdots \\ \langle \phi_N, f \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \phi_0, \phi_0 \rangle & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \langle \phi_1, \phi_1 \rangle & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \langle \phi_n, \phi_m \rangle & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & \langle \phi_N, \phi_N \rangle \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} \quad (2.29)$$

Az ortogonalitás legnagyobb előnye, hogy a spektrális együtthatók egyszerűbben a mátrix kiszámítása nélkül meghatározhatók:

$$a_n = \frac{\langle \phi_n, f \rangle}{\langle \phi_n, \phi_n \rangle} \quad n = 0, 1, \dots, N. \quad (2.30)$$

Az ortogonalitás részletesebb magyarázatát lásd az Appendix A.1.2. és A.1.3. fejezetében.

A (2.30) egyenlet folytonos és diszkrét esetben is érvényes, ha a bázisrendszer ortogonális. A numerikus integrálással célunk az $\langle \phi_n, \phi_n \rangle_F \cong \langle \phi_n, \phi_n \rangle_D$ és $\langle \phi_n, f \rangle_F \cong \langle \phi_n, f \rangle_D$ minél pontosabb közelítése.

2.2.1.2. Pszeudó spektrál háló

Minden bázisfüggvény rendszerhez két optimális háló tartozik, név szerint: „Roots grid” (Gauss pontok), és a „Endpoints – plus – Extrema grid” (Lobatto pontok).

Roots Grid (Gauss pontok): Az $N + 1$ db interpolációs pont (abszcissza) x_i a $\phi_{N+1}(x)$ polinom gyökei. A $\phi_n(x)$ bázisfüggvények ortogonális bázisrendszert alkotnak az $[a, b]$ intervallumon, a w_i pedig az $N + 1$ db súly. A Gauss féle integrálás súlyfüggvénnyel:

$$\int_a^b \rho(x) \cdot f(x) dx = \sum_{i=1}^{N+1} w_i f(x_i). \quad (2.31)$$

A w_i kvadratúra súlyok:

$$w_i = \int_a^b \rho(x) \cdot C_i(x) dx. \quad (2.32)$$

Ha megengedjük, hogy az interpolációs pontok abszcisszája x_i és a súlyok w_i is ismeretlenek legyenek, akkor kétszer annyi szabadságfok van, amit megválaszthatunk, hogy maximalizáljuk a módszer pontosságát, ezért ez $2N + 1$ fokú polinomra (akár trigonometrikusra is) pontos.

Endpoints plus Extrema Grid (Lobatto pontok): Lobatto megállapította, hogy a Gauss kvadratúra minden jó tulajdonságával rendelkező numerikus integrálási formulát érhetünk el, ha az osztáspontoknak a $\phi_N(x)$ polinom első deriváltjának zérus he-

lyeit, első és utolsó elemnek pedig a két végpontot választjuk, így az $N + 1$ db absz-
cissza az alábbi:

$$x_i = [a; \frac{d\phi_N}{dx} = 0; b]. \quad (2.33)$$

Az integrálás:

$$\int_a^b \rho(x) \cdot f(x) dx = \sum_{i=0}^N w_i f(x_i). \quad (2.34)$$

A w_i kvadratura súlyok:

$$w_i = \int_a^b \rho(x) \cdot C_i(x) dx. \quad (2.35)$$

Az így kapott integrál pontos $2N - 1$ fokú polinomra, ami kicsit pontatlanabb, mint a Roots grid-el kapott integrál, de még így is elég pontos és peremérték problémákhoz előnyösebb, mint a Roots háló. Ennek oka, hogy a peremfeltételekből azonnal meghatározható a két szélső osztópontban az ismeretlen $u(x)$ függvény értéke.

Roots háló akkor előnyösebb, amikor a differenciálegyenlet szinguláris a végpontjaiban – például henger koordináta rendszer esetén általában $r = 0$ -ban szingularitás van, még akkor is, ha a megoldás tökéletesen sima az origóban.

A következő fejezetekben bemutatjuk periodikus és nem periodikus peremfeltételek esetén az optimális hálókat, illetve a keletkezett kollokációs pontokra illeszthető Lagrange féle karakterisztikus bázisfüggvényeket.

2.2.2. NEM PERIODIKUS PEREM

Nem periodikus perem esetén a bázisfüggvényeknek célszerű Chebyshev polinomokat használni, mivel könnyű bánni vele, és az osztópontok x_i analitikusan meghatározhatóak. A Chebyshev polinomok az alábbi formában írhatóak (lásd: Boyd (2001)):

$$\begin{aligned} T_0(x) &\equiv 1, \quad T_1(x) \equiv x, \\ T_{n+1}(x) &\equiv 2x \cdot T_n(x) - T_{n-1}(x) \quad n \geq 1, \\ [T_0, T_1, \dots, T_N] &\in [-1, 1]. \end{aligned} \quad (2.36)$$

A Chebyshev polinomok ortogonális bázisrendszert alkotnak $[-1, 1]$ intervallumon:

$$\langle T_n, T_m \rangle_F = \int_{-1}^1 \rho(x) \cdot T_n(x) \cdot T_m(x) dx = \begin{cases} \pi & n = m = 0 \\ \frac{\pi}{2} & n = m \neq 0 \\ 0 & n \neq m \end{cases} \quad (2.37)$$

Ahol, a súlyfüggvény $\rho(x)$ szerepe, hogy biztosítsa az ortogonalitást, mely az alábbi formában írható fel:

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}. \quad (2.38)$$

Például $N = 4$ -re az alábbi 5×5 -ös $\underline{\Phi}$ együttható mátrix (lásd: (1.45), (2.16) és (2.29) egyenletek) írható fel a bázisfüggvények belső szorzataiból:

$$\underline{\Phi}_F = \begin{bmatrix} \langle T_0, T_0 \rangle_F & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \langle T_1, T_1 \rangle_F & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle T_2, T_2 \rangle_F & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \langle T_3, T_3 \rangle_F & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \langle T_4, T_4 \rangle_F \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \pi & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pi/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pi/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pi/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pi/2 \end{bmatrix} \quad (2.39)$$

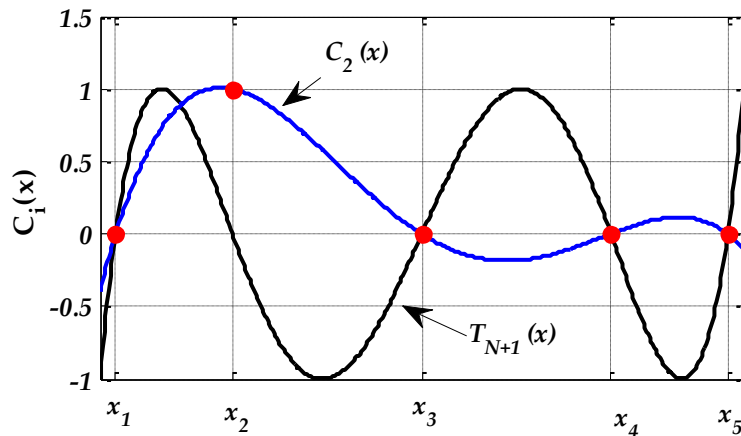
Az alsó indexbe írt F jelöli, hogy a mátrix elemeit folytonos függvények integrálásával határozzuk meg, ahogyan ez a Galerkin módszernél szokás. Ezt az együttható mátrixot fogjuk közelíteni az elemek numerikus integrálásával.

2.2.2.1. Roots Grid

„Roots Grid” esetén az x_j osztópontok a $T_{N+1}(x)$ Chebyshev polinom gyökei, melyek kifejezhetők az alábbi módon:

$$x_j = \cos\left(\pi \frac{2j+1}{2 \cdot (N+1)}\right) \quad j = 0, 1, \dots, N. \quad (2.40)$$

Lagrange féle karakterisztikus függvényeket $C_j(x)$ illesztünk az így meghatározott x_j abszcisszákra, melyekre szükség lesz a kvadratura súlyok meghatározásához. Mivel x_j osztópontok a $T_{N+1}(x)$ polinom zérus helyei, az $N+1$ -ed fokú Chebyshev polinom $T_{N+1}(x)$ nagyon hasonló ahhoz a függvényhez, amit keresünk, azzal a különbséggel, hogy x_i helyen nulla helyett egyet szeretnénk kapni.



2.4. ábra: Lagrange féle bázis és Chebyshev polinom közötti hasonlóság szemléltetés $N=4$ esetén. A fekete görbe a Chebyshev polinomot, a kék görbe a Lagrange féle bázist jelöli. A piros pontok a Lagrange féle bázis x_j abszcisszáiban vett értékei $i=j=2$ -ben $C_2(x_2)=1$, az összes többiben $C_2(x_i)=0$.

A 2.4. ábrán látunk példát a Lagrange féle karakterisztikus bázisfüggvény és a Chebyshev polinom kapcsolatára. A második Lagrange féle bázis $C_2(x)$ (kék) csak a $i=2$ pontban ad egyet eredményül, az összes többi osztáspontban nullát, mint a Chebyshev polinom (fekete). Mivel a Chebyshev polinom ötöd rendű ($N+1=5$), ezért öt db zérus helyet (kvadratura pontot) kapunk, így a numerikus integrálással kapott együttható mártix összehasonlítható lesz a folytonos (2.39) mátrixszal.

A Lagrange féle bázis meghatározásához először írjuk fel $T_{N+1}(x)$ Taylor sorát az x_i hely közelében a másodrendű tagtól elhagyva:

$$T_{N+1}(x) \cong \underbrace{T_{N+1}(x_i)}_0 + T_{N+1,x}(x_i) \cdot (x - x_i) + O[(x - x_i)^2], \quad (2.41)$$

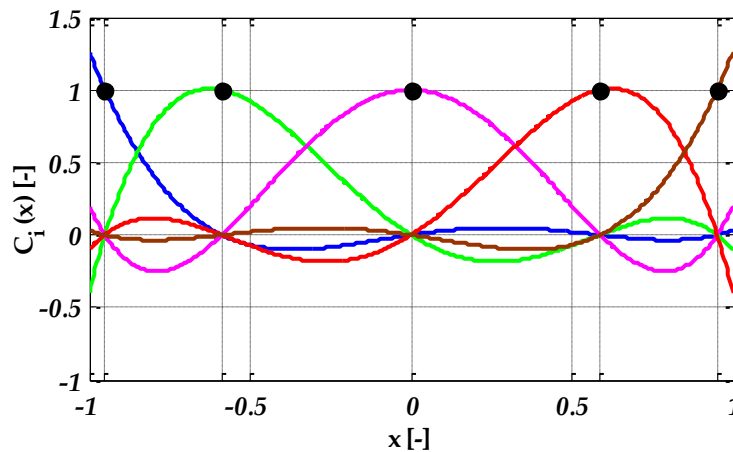
ahol az alsó index az x szerinti deriváltat jelöl. Mivel x_i a $T_{N+1}(x)$ polinom egyik zérus helye, ezért az egyenlet jobb oldalának első tagja nulla. Az egyenletet rendezve

$$\frac{T_{N+1}(x)}{T_{N+1,x}(x_i) \cdot (x - x_i)} \cong 1 + O[(x - x_i)^2], \quad (2.42)$$

összefüggést kapjuk. Ha $x = x_i$ az egyenlet pontosan egyet ad, tehát az egyenlet bal oldala a Lagrange féle bázis felírása Chebyshev polinommal Roots grid hálón:

$$C_i(x) = \frac{T_{N+1}(x)}{T_{N+1,x}(x_i) \cdot (x - x_i)}. \quad (2.43)$$

Az 5 elemű Roots háló interpolációs pontjaira illesztett Lagrange féle karakterisztikus bázisok a 2.5. ábrán láthatóak.



2.5. ábra: Chebyshev polinomból képzett Lagrange féle bázisfüggvények Roots Grid hálón, ahol az interpolációs pontok a $T_5(x)$ polinom gyökei. A különböző színek a $C_i(x)$ függvényeket jelölik, $i=1,..5$. A fekete pontok az osztáspontban vett $C_i(x_i)=1$ függvényértékeket

Így a kvadratura súlyok már meghatározhatóak (2.32) alapján:

$$w_i = \int_{-1}^1 \rho(x) \cdot C_i(x) dx; \quad w_i = \pi/(N+1) \quad i = 0,1,2,...N \quad (2.44)$$

A kvadratura súlyokat ismerve a numerikus integrálás már elvégezhető:

$$\langle T_n, T_n \rangle = \sum_{i=0}^N w_i \cdot T_n(x_i) \cdot T_n(x_i) \quad n = 0, 1, 2, \dots, N. \quad (2.45)$$

Ha $N = 4$, akkor a kvadratura pontok a $T_5(x)$ Chebyshev polinom gyökei, ahogy a 2.5. ábrán látni. A kvadratura súlyokra pedig $w_i = \pi/5$ adódik. Elvégezve a numerikus integrálást (2.45) egyenlet alapján a kapott együttható mátrix:

$$\Phi_{=D} = \begin{bmatrix} \langle T_0, T_0 \rangle_D & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \langle T_1, T_1 \rangle_D & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle T_2, T_2 \rangle_D & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \langle T_3, T_3 \rangle_D & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \langle T_4, T_4 \rangle_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \pi & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pi/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pi/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pi/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pi/2 \end{bmatrix} \quad (2.46)$$

Ha összevetjük a folytonos (2.39) és a numerikus (2.46) integrálással kapott együttható mátrixokat, láthatjuk, hogy minden elem megegyezik $\langle T_n, T_n \rangle_F = \langle T_n, T_n \rangle_D$. Mivel a mátrixok utolsó elemei $\langle T_N, T_N \rangle$ is megegyeznek, ez a háló legalább $2N$ -ed fokú polinomra pontos megoldást ad. (Szakirodalom alapján Canuto et al. (2006) $2N+1$ -re is pontos). Mivel a bázisok ortogonálisak az együtthatókat (2.30) alapján határozzuk meg. A numerikus integrálással és a Galerkin módszerrel meghatározott számláló ekvivalens, így a diszkrét módszer pontatlanságát csak a nevező közelítése okozza: $\langle T_n, f \rangle_F \cong \langle T_n, f \rangle_D$.

2.2.2.2. Extrema plus Endpoints Grid

Az x_j osztópontok a $T_{N,x}(x)$ Chebyshev polinom x szerinti deriváltjának gyökei és a tartomány két széle $x_0 = -1$ és $x_N = 1$. Az interpolációs pontok az alábbi összefüggéssel is kifejezhetők:

$$x_j = \cos\left(\frac{\pi \cdot j}{N}\right) \quad j = 0, 1, \dots, N. \quad (2.47)$$

A Roots hálónál már bemutatott módon szeretnénk a pontokra illesztett Lagrange féle bázisfüggvényeket levezetni. Az interpolációs pontokra az alábbi polinom illeszthető:

$$(1-x^2) \cdot T_{N,x}(x). \quad (2.48)$$

A belső pontokon áthalad $T_{N,x}(x)$ Chebyshev polinom, a két szélső ponton történő áthaladás érdekében ezt szoroztuk $(1-x^2)$ -el. Lagrange féle bázist az előzőhöz hasonlóan kapjuk, felírjuk a (2.48) polinom Taylor sorát a másodrendű tagtól elhagyva x_i hely közelében:

$$(1-x^2) \cdot T_{N,x}(x) \cong \underbrace{(1-x_i^2) \cdot T_{N,x}(x_i)}_0 + [(1-x_i^2) \cdot T_{N,x}(x_i)]_x \cdot (x-x_i) + O[(x-x_i)^2]. \quad (2.49)$$

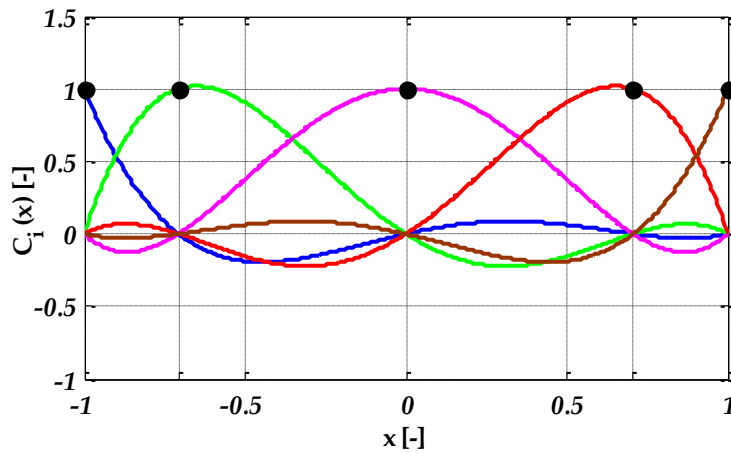
Az egyenlet jobb oldalának első tagja x_i helyen nulla. Rendezés után az alábbi egyenletet kapjuk:

$$\frac{(1-x^2) \cdot T_{N,x}(x)}{[(1-x_i^2) \cdot T_{N,x}(x_i)]_x \cdot (x-x_i)} \cong 1 + O[(x-x_i)^2]. \quad (2.50)$$

Mivel az összefüggés x_i helyen pontosan egyet ad eredményül, a Lagrange féle bázisfüggvény az egyenlet bal oldalán lévő taggal egyezik meg:

$$C_i(x) = \frac{(1-x^2) \cdot T_{N,x}(x)}{[(1-x_i^2) \cdot T_{N,x}(x_i)]_x \cdot (x-x_i)}. \quad (2.51)$$

A 2.6. ábrán látunk példát az öt elemű Extrema hálóra, és a kollokációs pontokra illesztett Lagrange féle bázisokra.



2.6. ábra: Chebyshev polinomból képzett Lagrange féle bázisfüggvények Extrema Grid hálón, az osztáspontok: $[-1, T_{4,x}(x)=0; 1]$. A különböző színek a $C_i(x)$ függvényeket jelölik, $i=1,..5$. A fekete pontok az osztáspontban vett $C_i(x_i)=1$ függvényértékeket

A (2.35) alapján kvadratúra súlyok meghatározhatók:

$$w_i = \int_{-1}^1 \rho(x) \cdot C_i(x) dx; \quad \begin{aligned} w_i &= \pi/(2N) & i=0; & i=N \\ w_i &= \pi/N & 1 \leq i \leq N-1 \end{aligned} \quad (2.52)$$

Tekintsük újra a példát $N=4$ esetén. Ekkor (2.47)-nek megfelelően öt db kvadratúra pont adódik, melyekhez tartozó kvadratúra súlyok:

$$w = \left[\frac{1}{2}, 1, 1, 1, \frac{1}{2} \right] \cdot \frac{\pi}{4}. \quad (2.53)$$

Így a (2.45) egyenlethez hasonlóan a numerikus integrálás elvégezhető. Az alábbi 5×5 együttható mátrix adódik:

$$\Phi_D = \begin{bmatrix} \langle T_0, T_0 \rangle_D & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \langle T_1, T_1 \rangle_D & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle T_2, T_2 \rangle_D & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \langle T_3, T_3 \rangle_D & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \langle T_4, T_4 \rangle_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \pi & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pi/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pi/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pi/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \pi \end{bmatrix} \quad (2.54)$$

A folytonos (2.39) és a diszkrét (2.54) integrálással kapott együttható mátrixokat összevetve láthatjuk, hogy az utolsó elemet kivéve $\langle T_4, T_4 \rangle_F \neq \langle T_4, T_4 \rangle_D$ az együttható mátrix megegyezik. Ebből látszik, hogy az integrálás legalább $2N-2$ fokú polinomra pontos, viszont irodalom alapján (melynek bizonyítását lásd: Canuto et al. (2006)) $2N-1$ -re is. Az együttható mátrix kicsit rosszabbul van közelítve, mint az előző esetben, viszont még így is nagyon jó közelítés.

2.2.3. PERIODIKUS PEREM

Periodikus peremfeltétel esetén harmonikus függvényeket használunk bázisként, mivel automatikusan kielégítik a peremfeltételeket:

$$F_i^{(1)} = \begin{cases} i = 0 & F_0 = 1 \\ i \text{ páratlan} & F_i = \cos\left(\frac{i+1}{2} \cdot x\right), \\ i \text{ páros} & F_i = \sin\left(\frac{i}{2} \cdot x\right) \end{cases}, \quad (2.55)$$

ahol $i = 0, 1, \dots, N-1$. A (2.55) kifejezésben páros és páratlan tagok fordítva is felírhatóak:

$$F_i^{(2)} = \begin{cases} i = 0 & F_0 = 1 \\ i \text{ páratlan} & F_i = \sin\left(\frac{i+1}{2} \cdot x\right), \\ i \text{ páros} & F_i = \cos\left(\frac{i}{2} \cdot x\right) \end{cases}. \quad (2.56)$$

A harmonikus függvények mindkét felírás ($F_i^{(1)}$ és $F_i^{(2)}$) esetén ortogonális bázisrendszert alkotnak a $[0, 2\pi]$ intervallumon:

$$\langle F_i, F_j \rangle_F = \int_0^{2\pi} \rho(x) \cdot F_i(x) \cdot F_j(x) dx = \begin{cases} 2\pi & i = j = 0 \\ \pi & i = i \neq 0 \\ 0 & i \neq j \end{cases}, \quad (2.57)$$

ahol a súlyfüggvény:

$$\rho(x) = 1. \quad (2.58)$$

Például $N = 4$ -re az alábbi 4×4 -es együtthatómátrix írható fel a bázisfüggvények belső szorzataiból:

$$\Phi_F = \begin{bmatrix} \langle F_0, F_0 \rangle_F & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \langle F_1, F_1 \rangle_F & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle F_2, F_2 \rangle_F & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \langle F_3, F_3 \rangle_F \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\pi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pi \end{bmatrix}. \quad (2.59)$$

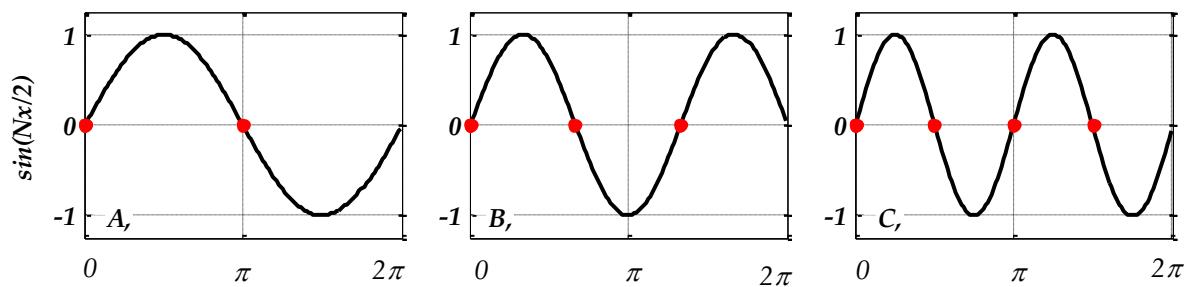
Az így kapott mátrix $\underline{\Phi}_F$ gyakorlatilag a Galerkin módszer együttható mátrixával egyezik meg. Most is ezt szeretnénk közelíteni a Gauss féle numerikus integrálás segítségével. Szakirodalom alapján most is két optimális háló létezik, és mint azt látni fogjuk nem tetszőleges, hogy a bázisok (2.55) és (2.56) felírási módja közül, mikor melyiket használhatjuk.

2.2.3.1. Extrema Grid

Az interpolációs pontok a $\sin(x \cdot N/2)$ függvény zérus helyei, amik analitikusan kifejezhetők:

$$x_j = \frac{2\pi \cdot j}{N} \quad j = 0, 1, \dots, N-1. \quad (2.60)$$

Fontos, hogy N páros szám legyen, mert ekkor kapunk 2π szerint periodikus Lagrange bázisfüggvényt, ahogy ez a 2.7. ábrából is látszik. Az A, és C, diagramon az N páros, az abszcisszákra illesztett harmonikus függvény periodikus 2π szerint, viszont a B, diagramon, $N=3$ esetén, az interpolációs pontokon áthaladó harmonikus függvény nem 2π szerint periodikus.



2.7. ábra: Az x_j interpolációs pontra illeszthető harmonikus függvények, A) diagramon $N=2$; B) diagramon $N=3$; C) diagramon $N=4$ esetében.

A előzőekhez hasonlóan, most is egy Lagrange féle bázisfüggvényt szeretnénk bevezetni, amely áthalad az interpolációs pontokon, és csak x_i -ben ad nulla helyett egyet eredményül. A $\sin((x - x_i) \cdot N/2)$ kiindulásnak alkalmas. Ezt kell szoroznunk egy olyan periodikus függvénnyel, amely x_i -ben a végtelenbe tart, és a két függvény szorzata korlátos. Egy ilyen függvény lehet a kotangens:

$$\xi(x) = \cot\left(\frac{x - x_i}{2}\right). \quad (2.61)$$

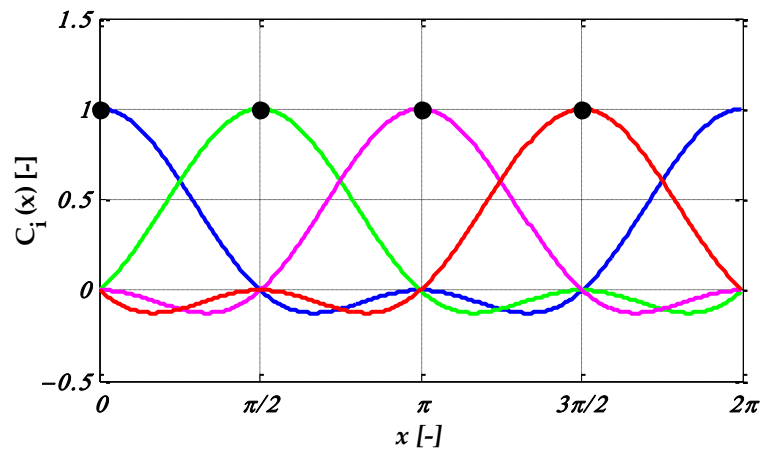
A két függvény szorzatának határértéke x_i -ben a L'Hospital szabály alkalmazásával kiszámítható.

$$\lim_{x \rightarrow x_i} \left[\underbrace{\sin\left(\frac{N(x-x_i)}{2}\right)}_0 \cdot \underbrace{\cot\left(\frac{x-x_i}{2}\right)}_\infty \right] \stackrel{L'H}{=} \frac{\overbrace{\cos\left(\frac{N(x-x_i)}{2}\right)}^1 \cdot \frac{N}{2}}{\underbrace{\frac{1}{2} \sec^2\left(\frac{x-x_i}{2}\right)}_1} = N. \quad (2.62)$$

A határértékkel normálva a két függvény szorzatát, megkapjuk a Lagrange féle bázisfüggvényt:

$$C_i(x) = \frac{1}{N} \sin\left(\frac{N(x-x_i)}{2}\right) \cdot \cot\left(\frac{x-x_i}{2}\right). \quad (2.63)$$

Mivel periodikus függvényeket szorzunk egymással $C_i(x)$ is periodikus függvény. Például $N = 4$ esetén a Lagrange féle bázisfüggvények 2.8. ábrán láthatóak.



2.8. ábra: Lagrange féle bázisfüggvények periodikus peremfeltétel esetén, Extrema hálón, a kék a 0, a zöld a $\pi/2$, lila π , piros $3\pi/2$ pontra illesztett Lagrange féle bázisfüggvény

A kvadratúra súlyok:

$$w_i = \int_0^{2\pi} C_i(x) dx; \quad w_i = \frac{\pi}{2} \quad i = 0, 1, \dots, N-1 \quad (2.64)$$

Az integrál numerikus közelítése az első felírással:

$$\int_0^{2\pi} F_i(x) \cdot F_j(x) \cdot dx = \sum_{j=0}^{N-1} w_j \cdot F_i^{(1)}(x_j) \cdot F_j^{(1)}(x_j). \quad (2.65)$$

Például 4 pontra felírt mátrix diszkrét esetben:

$$\Phi \equiv_D \begin{bmatrix} \langle F_0^{(1)}, F_0^{(1)} \rangle_D & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \langle F_1^{(1)}, F_1^{(1)} \rangle_D & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle F_2^{(1)}, F_2^{(1)} \rangle_D & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \langle F_3^{(1)}, F_3^{(1)} \rangle_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\pi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\pi \end{bmatrix} \quad (2.66)$$

Az integrálok numerikus közelítésével kapott együttható mátrixot (2.66) összevetve a folytonos függvények integrálásával kapott együttható mátrixszal (2.59), látható hogy, a diszkrét integrál a $\underline{\Phi}_D$ csak az együttható mátrix utolsó elemére nem ad pontos megoldást. Ebből látható, hogy az „Extrema” hálón végzett integrál közelítés legalább $2N - 2$ -re (utolsó előtti elem) pontos eredményt ad, viszont irodalom alapján $2N - 1$ -re is pontos.

Mivel az első felírási módot (2.55) alkalmaztuk a $\underline{\Phi}_D$ az utolsó tagja $F_3^{(1)} = \cos(2x)$, az osztópontok pedig $\sin(2x)$ zérus helyei ($j\pi/2$) (lásd: 2.7. ábra C, diagram, piros pontok és 2.8. ábra fekete pontok). Nézzük meg, hogyan alakul az együttható mátrix, ha a második felírási módot (2.56) választjuk. Ekkor a mátrix utolsó tagja $F_3^{(1)} = \sin(2x)$, az osztópontok pedig továbbra is $\sin(2x)$ zérus helyi. Elvégezve a numerikus integrálást (2.65) alapján az együttható mátrix utolsó elemére nulla adódik:

$$\sum_{j=0}^{N-1} w_j \cdot F_3^{(2)}(x_j) \cdot F_3^{(2)}(x_j) = \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\pi}{2} \cdot \underbrace{\sin(j\pi)}_0 \cdot \underbrace{\sin(j\pi)}_0 = 0. \quad (2.67)$$

Az együttható mátrix ekkor szinguláris (nem invertálható, azaz $\det \underline{\Phi}_D = 0$) lesz:

$$\underline{\Phi}_D = \begin{bmatrix} \langle F_0^{(2)}, F_0^{(2)} \rangle_D & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \langle F_1^{(2)}, F_1^{(2)} \rangle_D & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle F_2^{(2)}, F_2^{(2)} \rangle_D & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \langle F_3^{(2)}, F_3^{(2)} \rangle_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\pi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.68)$$

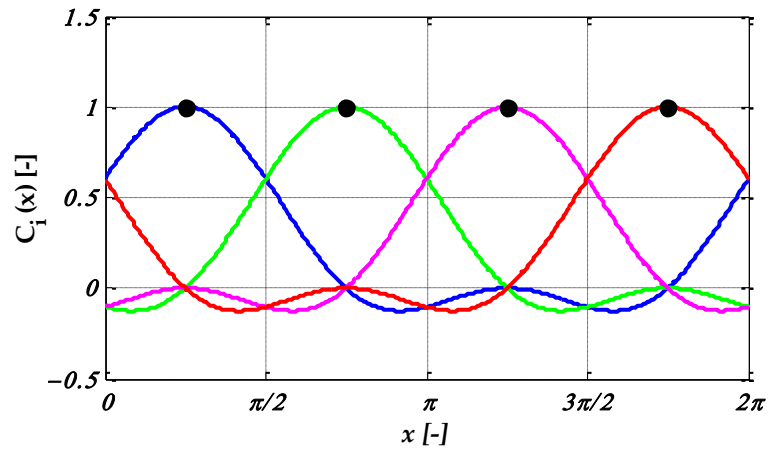
A fentiek alapján megjegyzendő, hogy ha harmonikus függvényeket választunk bázisként és „Extrema” hálót alkalmazunk, az első felírási módot kell használnunk. Az N páros szám kell, hogy legyen, mivel akkor kapunk 2π szerint periodikus Lagrange féle karakterisztikus bázisfüggvényeket (lásd: 2.7 ábra és hozzá tartozó magyarázat), így az együttható mátrix utolsó tagjában $\cos(N/2 \cdot x)$ szerepel, ezzel elkerültük a szingularitást.

2.2.3.2. Roots Grid

„Roots Grid” esetén az „Extrema” háló interpolációs pontjait eltoljuk π/N -el, így a kollokációs pontok az alábbi összefüggéssel határozhatók meg:

$$x_j = \frac{2\pi \cdot j}{N} + \frac{\pi}{N} = \frac{\pi(2j+1)}{N} \quad j = 0, 1, \dots, N-1 \quad (2.69)$$

Az így kapott osztópontok a $\cos(N/2 \cdot x)$ függvény zérus helyei. Fontos megjegyezni, hogy N továbbra is páros szám kell, hogy legyen.



2.9. ábra: Lagrange féle bázisfüggvények periodikus peremfeltétel esetén, Roots hálón, a kék a $\pi/4$, a zöld a $3\pi/4$, lila $5\pi/4$, piros $7\pi/4$ pontra illesztett Lagrange féle bázisfüggvény

A kvadratura súlyok kiszámításához, most is szükség van a kollokációs pontokra illesztett Lagrange féle karakterisztikus bázisfüggvényre. Ez az „Extrema” hálónál már ismertetettel megegyezik:

$$C_i(x) = \frac{1}{N} \sin\left(\frac{N(x-x_i)}{2}\right) \cdot \cot\left(\frac{x-x_i}{2}\right). \quad (2.70)$$

Az interpolációs pontokra illesztett Lagrange bázisok a 2.9. ábrán látható. Ez a karakterisztikus függvény jó bármilyen eltolással kapott hálóra, ha az x_i osztáspontokat egyenközüen vettük fel. Mivel a karakterisztikus függvény megegyezik, a $C_i(x)$ integrálásával kapott kvadratura súlyok is meg fognak egyezni:

$$w_i = \int_0^{2\pi} C_i(x) dx; \quad w_i = \frac{\pi}{2} \quad i = 0, 1, \dots, N-1 \quad (2.71)$$

Ezzel a numerikus integrálás már elvégezhető. Hasonlítsuk össze a $N = 4$ db osztáspontra kapott numerikus integrálással kapott együttható mátrixot a (2.59) pontos megoldással. Ha az első felírási módot (2.55) választjuk akkor az utolsó tag $F_3^{(1)} = \cos(2x)$. Az osztáspontok pontok pedig (2.69) alapján $\pi \cdot j/2 + \pi/4$, azaz $\cos(2x)$ zérus helyei. Ezért az együttható mátrix utolsó elemére nullát kapunk:

$$\sum_{j=0}^{N-1} w_j \cdot F_3^{(1)}(x_j) \cdot F_3^{(1)}(x_j) = \sum_{j=0}^{N-1} \underbrace{\frac{\pi}{2}}_0 \cdot \underbrace{\cos\left(\frac{j\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right)}_0 \cdot \cos\left(\frac{j\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right) = 0 \quad (2.72)$$

Az együttható mátrix az első bázisok első felírási módjával:

$$\Phi_D = \begin{bmatrix} \langle F_0^{(1)}, F_0^{(1)} \rangle_D & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \langle F_1^{(1)}, F_1^{(1)} \rangle_D & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle F_2^{(1)}, F_2^{(1)} \rangle_D & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \langle F_3^{(1)}, F_3^{(1)} \rangle_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\pi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.73)$$

Az együttható mátrix a második felírási móddal:

$$\Phi_{\equiv D} = \begin{bmatrix} \langle F_0^{(2)}, F_0^{(2)} \rangle_D & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \langle F_1^{(2)}, F_1^{(2)} \rangle_D & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle F_2^{(2)}, F_2^{(2)} \rangle_D & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \langle F_3^{(2)}, F_3^{(2)} \rangle_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\pi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\pi \end{bmatrix} \quad (2.74)$$

A második felírási móddal kapott együttható mátrix (2.74) csak az utolsó elemében tér el a folytonos függvényintegrálással meghatározott együttható mátrixtól (2.59), ebből láthatjuk, hogy ez a módszer is legalább $2N - 2$ -re pontos.

A fentebbiek alapján látható, hogy „Roots Grid” hálón az első felírási móddal szinguláris mátrixot kapunk, tehát az nem jó. A második felírási módot kell alkalmazni páros N esetén ekkor az utolsó tag $\sin(N/2 \cdot x)$ ezzel elkerültük a mátrix szingularitását.

2.2.3.3. Eltolt háló

Ahogy az előzőekben láttuk a „Roots” háló az „Extrema” háléhoz képest $1/2$ periódusnyival (π) van eltolva. Most olyan hálót készítünk, amin az eltolás $1/4$ és $3/4$ periódusnyi. Ha $1/4$ -es eltolást alkalmazunk akkor az osztáspontok:

$$x_j = \frac{2\pi \cdot j}{N} + \frac{1}{4} \frac{2\pi}{N} = \frac{\pi}{N} \left(2j + \frac{1}{2} \right) \quad j = 0, 1, \dots, N-1, \quad (2.75)$$

ha $3/4$ -es eltolás hálót készítünk, akkor pedig:

$$x_j = \frac{2\pi \cdot j}{N} + \frac{3}{4} \frac{2\pi}{N} = \frac{\pi}{N} \left(2j + \frac{3}{2} \right) \quad j = 0, 1, \dots, N-1. \quad (2.76)$$

A Lagrange féle karakterisztikus bázisfüggvények minden eltolás egyenként hálóra megegyezik, ezért a Lagrange féle bázis integrálásával kapott kvadratura súlyok megegyeznek:

$$C_i(x) = \frac{1}{N} \sin\left(\frac{N(x - x_i)}{2}\right) \cdot \cot\left(\frac{x - x_i}{2}\right). \quad (2.77)$$

$$w_i = \int_0^{2\pi} C_i(x) dx; \quad w_i = \frac{\pi}{2} \quad i = 0, 1, \dots, N-1 \quad (2.78)$$

Elvégezve a numerikus integrálást $N = 4$ esetén, mindkét felírási móddal az alábbi együttható mátrixot kapjuk:

$$\Phi_{\equiv D} = \begin{bmatrix} \langle F_0, F_0 \rangle_D & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \langle F_1, F_1 \rangle_D & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle F_2, F_2 \rangle_D & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \langle F_3, F_3 \rangle_D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\pi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \pi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \pi \end{bmatrix} \quad (2.79)$$

amely, minden eleme megegyezik a folytonos függvényintegrálással kapott együttható mátrixával. Ebből látszik, hogy ez legalább $2N$ -re pontos eredményt ad. Fü-

getlenül attól, hogy a mátrix utolsó elemében $\sin(N/2 \cdot x)$ vagy $\cos(N/2 \cdot x)$ van nem lesz szinguláris. Ezzel a fajta hálóeltolással a szakirodalomban még nem találkoztunk. Ekkor a mátrix közelítése pontos a numerikus módszer hibáját csak $\langle F_n, f \rangle_F \cong \langle F_n, f \rangle_D$ közelítése okozza.

2.2.4. MÁTRIX SZORZAT TRANSZFORMÁCIÓ

Összefoglalva az eddigieket, célunk az ismert vagy ismeretlen $f(x)$ függvény minél jobb közelítése bázisfüggvények lineáris kombinációjaként előálló polinom segítségével, mely diszkrét esetben:

$$f(x) \cong P_N(x) = \sum_{n=0}^N a_n \phi_n(x), \quad (2.80)$$

ahol $\phi_n(x)$ ortogonális bázisrendszert alkot:

$$\langle \phi_n, \phi_m \rangle = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ 1/\kappa_n & n = m \end{cases}. \quad (2.81)$$

Ortogonális esetben az együtthatók az alábbi összefüggés segítségével meghatározhatók:

$$a_n = \frac{\langle \phi_n, f \rangle}{\langle \phi_n, \phi_n \rangle} = \kappa_n \cdot \langle \phi_n, f \rangle \quad n = 0, 1, \dots, N. \quad (2.82)$$

Mivel interpolációs módszerről van szó, diszkrét belső szorzatokkal számolunk:

$$\langle \phi_n, f \rangle_D = \sum_{i=0}^N w_i \cdot \phi_n(x_i) \cdot f(x_i) \quad n = 0, 1, \dots, N. \quad (2.83)$$

Az előző összefüggésbe helyettesítve az együttható az alábbi módon számolható:

$$a_n = \sum_{i=0}^N \kappa_n \cdot w_i \cdot \phi_n(x_i) \cdot f(x_i) \quad n = 0, 1, \dots, N. \quad (2.84)$$

Az együtthatókra az alábbi mátrixegyenlet adódik:

$$\underline{a} = \underline{\underline{M}} \cdot \underline{f}, \quad (2.85)$$

$$\begin{bmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \kappa_0 \cdot w_0 \cdot \phi_0(x_0) & \cdots & \kappa_0 \cdot w_i \cdot \phi_0(x_i) & \cdots & \kappa_0 \cdot w_N \cdot \phi_0(x_N) \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \kappa_n \cdot w_0 \cdot \phi_n(x_0) & \cdots & \kappa_n \cdot w_i \cdot \phi_n(x_i) & \cdots & \kappa_n \cdot w_N \cdot \phi_n(x_N) \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \kappa_N \cdot w_0 \cdot \phi_N(x_0) & \cdots & \kappa_N \cdot w_i \cdot \phi_N(x_i) & \cdots & \kappa_N \cdot w_N \cdot \phi_N(x_N) \end{bmatrix}}_{\underline{\underline{M}}} \cdot \begin{bmatrix} f(x_0) \\ \vdots \\ f(x_i) \\ \vdots \\ f(x_N) \end{bmatrix} \quad (2.86)$$

ahol: $\underline{\underline{M}}$ a szorzat transzformációs mátrix, w_i az i -dik pontban vett súly. Az együtthatók ilyen módszerrel történő meghatározását a szakirodalom „*Matrix Multiplication Transform*” MMT nevezi.

2.3. Deriváló mátrix

2.3.1. MÁTRIX SZORZAT TRANSZFORMÁCIÓN KERESZTÜL

Most, hogy meghatároztuk az optimális eloszlását az interpolációs pontoknak, a pontokban meg tudjuk határozni a függvény értékeit, vektoriális alakban írva:

$$\underline{f}^T = (f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_N)). \quad (2.87)$$

A célunk a függvény derivált értékeinek előállítása az interpolációs pontokban:

$$\underline{f}_x^T = (f_x(x_0), f_x(x_1), \dots, f_x(x_N)). \quad (2.88)$$

Ahol az alsó index az x szerinti deriválást jelenti. A függvények deriváltját az előző alak P_N deriválásával kapjuk, (lásd (2.4) egyenletek):

$$f_x \cong P_{N,x}(x) = \sum_{n=0}^N a_n \cdot \phi_{n,x}(x). \quad (2.89)$$

Mátrix alakban felírva:

$$\begin{bmatrix} f_x(x_0) \\ f_x(x_1) \\ \vdots \\ f_x(x_N) \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \phi_{0,x}(x_0) & \phi_{0,x}(x_1) & \cdots & \phi_{0,x}(x_N) \\ \phi_{1,x}(x_0) & \phi_{1,x}(x_1) & \cdots & \phi_{1,x}(x_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \phi_{N,x}(x_0) & \phi_{N,x}(x_1) & \cdots & \phi_{N,x}(x_N) \end{bmatrix}}_{\phi_x} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} \quad (2.90)$$

$$\underline{f}_x = \phi_x \cdot \underline{a} \quad (2.91)$$

Az együtthatók $\{a_n\}$ a mátrix szorzat transzformáció segítségével meghatározhatók:

$$\underline{a} = \underline{\underline{M}} \cdot \underline{f}. \quad (2.92)$$

Ezt behelyettesítve a (2.91) egyenletbe, a függvény deriváltja meghatározható:

$$\underline{f}_x = \phi_x \cdot \underline{\underline{M}} \cdot \underline{f} = \underline{\underline{D}} \cdot \underline{f}. \quad (2.93)$$

Ahol $\underline{\underline{D}}$ $(N+1) \times (N+1)$ -es deriváló mátrix. Ez alapján a k -adik x szerinti deriváltat előállíthatjuk, ha az $\underline{f}$ vektort a deriváló mátrix k -adik hatványával szorozzuk.

$$\underline{f}^{(k)} = \underline{\underline{D}}^k \cdot \underline{f}. \quad (2.94)$$

Gondoljunk vissza az 1.4.4. fejezetben feltett 1.) kérdésre, hogy nehezebb-e a spektrál módszert programozni, mint differencia sémát. Láthatjuk, hogy a fentebbi levezetések eredményeként, most is egy deriváló mátrixot kaptunk eredményül, mint korábban a centrális differenciasémánál is (lásd: (1.35) egyenlet). Tehát, a spektrál módszer használata semmivel nem bonyolultabb, mint a differencia séma, hiszen csak a deriváló mátrixot kell cserélnünk, és az osztáspontokat más eloszlással felvenni, programkód felépítése teljesen analóg.

2.3.2. A DERIVÁLÓ MÁTRIX ELEMEINEK ANALITIKUS MEGHATÁROZÁSA

Tekintsük az előző módon levezetett deriváló mátrix egy tetszőleges elemét:

$$D_{i,j} = \sum_{j=0}^N \kappa_j \cdot \phi_{i,x}(x_j) \cdot \phi_j(x_i) \quad (2.95)$$

Nagy felbontás esetén az ilyen módon számított elemek numerikus meghatározása pontatlan. Például Chebyshev bázis esetén $|x_i| \leq 1$ és az x_i^N nagy kitevőjű hatványai is szerepelnek a bázisfüggvényben, ami számábrázolási pontatlanságot eredményez. Ezért a deriváló mátrix elemei közvetlenebb módon, a Lagrange féle karakterisztikus bázisfüggvényekből is meghatározható. Az $N+1$ db kollokációs pontra illesztett polinom a Lagrange féle karakterisztikus bázisfüggvénnyel is felírható:

$$f(x_j) = P_N(x_j) = \sum_{i=0}^N f(x_i) \cdot C_i(x_j) \quad j = 0, 1, \dots, N \quad (2.96)$$

A derivált függvény közelítése az interpolációs pontokban:

$$f_x(x_j) \cong P_{N,x}(x_j) = \sum_{i=0}^N f(x_i) \cdot C_{i,x}(x_j) \quad (2.97)$$

Mátrix alakban írva:

$$\begin{bmatrix} f_x(x_0) \\ f_x(x_1) \\ \vdots \\ f_x(x_N) \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} C_{0,x}(x_0) & C_{1,x}(x_0) & \cdots & C_{N,x}(x_0) \\ C_{0,x}(x_1) & C_{1,x}(x_1) & \cdots & C_{N,x}(x_1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ C_{0,x}(x_N) & C_{1,x}(x_N) & \cdots & C_{N,x}(x_N) \end{bmatrix}}_{\underline{\underline{D}}} \cdot \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_N) \end{bmatrix} \quad (2.98)$$

Az így meghatározott $\underline{\underline{D}}$ deriváló mátrix ekvivalens a (2.94) egyenletben szereplő deriváló mátrixszal. A (2.98) elemeire ezzel a módszerrel a választott bázistól és alkalmazott hálótól függően egyszerű analitikus összefüggéseket vezethetünk. Ezek a levezetések egyszerűnek tűnnek, mivel csak polinomot kell deriválnunk és az osztáspontokat behelyettesíteni a megfelelő függvényekbe, azonban még sem triviálisak. A levezetések irodalmi hivatkozást sem találtunk. A dolgozatban alkalmazott bázisokra és hálókra levezettük a deriváló mátrixokat, a levezetések az Appendixben, Fourier bázis esetén B.1, Chebyshev rendszer esetén pedig a B.2 fejezetben (B.2.1 Roots háló, B.2.2 Extrema háló esetén) olvashatók.

Boyd (2001) Appendixében számos különböző bázisfüggvény és háló esetén megtalálhatók a deriváló mátrixok meghatározására szolgáló képletek.

2.4. Deriváló Mátrixok szimmetrikus problémák megoldásához

Ha a differenciálegyenlet megoldása tartalmaz valamilyenfajta szimmetriát, csökkentett számú bázisfüggvény alkalmazásával is megoldható a probléma, azon bázisok elhagyásával, amelyek nem tartalmazzák ugyanezt a szimmetriát. A szimmetrikus tulajdonságokat számos helyen kihasználják a fizikában, szerves és szervetlen

kémiában, de fontos az áramlástanban és számos gépészeti területen, mivel jelentősen csökkenthető a szükséges számítási kapacitás.

A legegyszerűbb ismert szimmetria a paritás. Az $f(x)$ függvény páros, ha szimmetrikus az origó körül, azaz:

$$f(x) = f(-x). \quad (2.99)$$

Az $f(x)$ függvény páratlan, vagy antiszimmetrikusnak is nevezik, ha:

$$f(x) = -f(-x). \quad (2.100)$$

Egy függvény egyszerre csak az egyik szimmetria tulajdonsággal rendelkezhet, ez alól egy kivétel van az $f(x) \equiv 0$ függvény. A paritás fontos, mivel a legtöbb alkalmazott bázisfüggvény rendszer (Fourier sor, Chebyshev, Legendre és Hermite polinomok) rendelkeznek valamelyik szimmetriatulajdonsággal $x=0$ -ra nézve. Ez alól kivétel a fél végtelen terek esetén alkalmazott Laguerre és racionális Chebyshev polinom. Ha előre meg tudjuk határozni a differenciálegyenlet megoldásának paritását, megfeleltethetjük a bázisfüggvényeink számát, ha a csak az azonos paritású bázisokat alkalmazzuk. Páros $f(x)$ függvény esetén:

$$f(x) = P_N(x) = \sum_{n=0}^{N/2} a_{2n} \cdot \phi_{2n}(x), \quad (2.101)$$

ahol $\phi_{2n}(x)$ a páros bázisfüggvény, a_{2n} pedig a páros bázisok együtthatója. Ha $f(x)$ páratlan, akkor:

$$f(x) = P_N(x) = \sum_{n=0}^{N/2} a_{2n+1} \cdot \phi_{2n+1}(x), \quad (2.102)$$

ahol $\phi_{2n+1}(x)$ a páratlan bázisfüggvény, a_{2n+1} pedig a hozzá tartozó együtthatók. Mivel csak fele annyi bázisfüggvényünk van az együtthatókra kapott differenciálegyenletek száma is feleződik. A Fourier sor tagjai nem csak az origóra nézve rendelkeznek valamelyik szimmetria tulajdonsággal, hanem $x=\pi/2$ körül is. Ennek eredményeképpen néha a differenciálegyenlet megoldásához szükséges bázisfüggvények száma negyedére is csökkenthető.

Szimmetrikus (páros) bázisfüggvények az origó körül:

- minden páros kitevőjű ortogonális polinom (Chebyshev, Legendre, Hermite...), kivéve Laguerre
- x^{2n} páros kitevőjű hatványai
- minden koszinusz függvény

Antiszimmetrikus (páratlan) bázisfüggvények az origó körül:

- minden páratlan kitevőjű ortogonális polinom, kivéve Laguerre
- x^{2n+1} páratlan kitevőjű hatványai
- Minden szinusz függvény

A trigonometrikus függvények dupla szimmetriáját az 2.1. táblázat foglalja össze.

Trigonometrikus függvény	Paritás $x = 0$ körül	Paritás $x = \pi/2$ körül
$\cos(2nx)$	Páros	Páros
$\cos((2n + 1)x)$	Páros	Páratlan
$\sin(2nx)$	Páratlan	Páratlan
$\sin((2n + 1)x)$	Páratlan	Páros

2.1. táblázat: A trigonometrikus függvények szimmetria tulajdonságai

Ha egy $f(x)$ függvény rendelkezik valamelyik paritással, akkor a deriváltjának $d^k f(x)/dx^k$ a paritása megváltozik, ha k páratlan szám. Ha k páros, akkor a paritás változatlan. Az állítás könnyen belátható: egy páros függvény hatványsora csak x^{2n} páros kitevőjű hatványait tartalmazza. Differenciálva a $(2n)x^{2n-1}$ páratlan kitevőjű bármilyen n esetén, így páratlan függvényt kapunk. A deriválást másodszor is elvégezve újra páros függvényhez jutunk. A deriváló mátrixok alkalmazásánál ezt szem előtt kell tartani, mivel páros és páratlan függvény deriválása eltérő deriváló mátrix segítségével történik.

Az eddigiek alapján klasszikus Galerkin spektrál módszer esetén már, tudunk szimmetrikus megoldókat írni. A parciális differenciálegyenlet megoldásával egyező paritású bázisfüggvényekkel dolgozunk csak, az eltérőket elhagyjuk. Ezzel fele annyi együtthatóra kapunk csak közönséges differenciálegyenletet, így csökkentve a számítási igényt. A célunk azonban az, hogy a pseudo-spektrál módszer esetén is ki tudjuk használni a szimmetriatulajdonságokat. A korábbiakhoz hasonló deriváló mátrix-ra és módosított hálóra lesz szükség.

2.4.1. SZIMMETRIKUS HÁLÓ ÉS DERIVÁLÓ MÁTRIX

A szimmetria kihasználásának lehetőségét az Extrema hálón keresztül mutatjuk be, mivel az **Hiba! A hivatkozási forrás nem található.** fejezetben ismertetésre kerülő alkalmazási példában (buborékmodell) is ezt fogjuk használni a hőmérsékletmező kiszámítására. A többi háló hasonlóképp szimmetrikussá tehető. Közelítsük az ismeretlen függvény a Lagrange féle karakterisztikus bázisok segítségével:

$$f(x) \cong P_N(x) = \sum_{i=0}^N C_i(x) \cdot f(x_i). \quad (2.103)$$

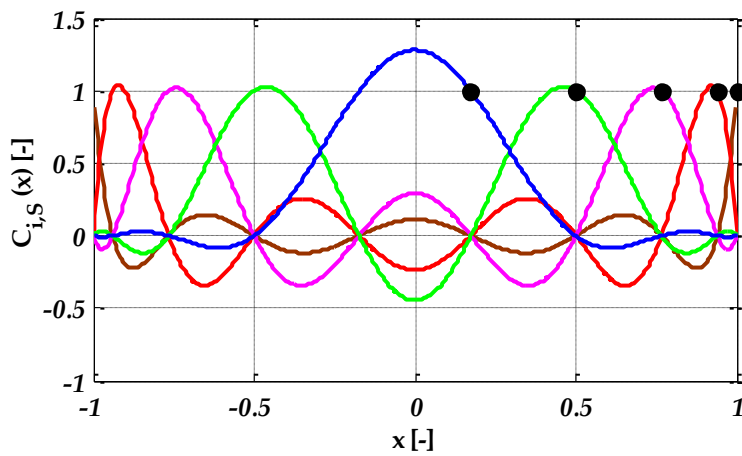
Ha $f(x)$ páros/páratlan akkor a Lagrange féle bázisoknak $C_i(x)$ is páros/páratlannak kell lenniük. Tekintsük először a páros esetet, ekkor: $f(x) = f(-x)$. Mivel a háló pontjai $x = 0$ -ra szimmetrikusan helyezkednek el:

$$f(x_i) = f(-x_i) = f(x_{N-i}), \quad (2.104)$$

A (2.104) alapján a (2.103) egyenlet másképp is felírható:

$$\begin{aligned}
P_N(x) &= \sum_{i=0}^{(N-1)/2} (C_i(x) \cdot f(x_i) + C_{N-i}(x) \cdot f(x_{N-i})) = \\
&= \sum_{i=0}^{(N-1)/2} (C_i(x) + C_{N-i}(x)) \cdot f(x_i) = \sum_0^{(N-1)/2} C_{i,S}(x) \cdot f(x_i),
\end{aligned} \tag{2.105}$$

ahol $C_{i,S}(x) = (C_i(x) + C_{N-i}(x))$ a szimmetrikus Lagrange féle karakterisztikus bázis. Fontos, hogy $x=0$ -ba ne kapjunk osztáspontot ezért $N+1$ páros szám kell, hogy legyen. Ezzel az átalakítással a számítási tartományt a felére a $[0, 1]$ intervallumra redukáltuk. Öt darab osztáspontra központosított szimmetrikus Lagrange féle karakterisztikus bázisfüggvényre mutat példát a 2.10. ábra. Az így meghatározott Lagrange bázisokat deriválva meghatározható az előzőekhez hasonló deriváló mátrix.



2.10. ábra: Példa szimmetrikus Lagrange féle karakterisztikus bázisfüggvényekre, Extrema hálón

A keresett páros függvény deriváltja a szimmetrikus (páros) Lagrange bázisokkal felírva az x_j osztáspontokban:

$$f_x(x_j) \equiv P_{N,x}(x_j) = \sum_{i=0}^{(N-1)/2} f(x_i) \cdot C_{i,S,x}(x_j). \tag{2.106}$$

ahol $j = 0, 1, \dots, (N-1)/2$, ezt mátrix alakban írva:

$$\begin{bmatrix} f_x(x_0) \\ f_x(x_1) \\ \vdots \\ f_x(x_{(N-1)/2}) \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} C_{0,S,x}(x_0) & C_{1,S,x}(x_0) & \cdots & C_{(N-1)/2,S,x}(x_0) \\ C_{0,S,x}(x_1) & C_{1,S,x}(x_1) & \cdots & C_{(N-1)/2,S,x}(x_1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ C_{0,S,x}(x_{(N-1)/2}) & C_{1,S,x}(x_{(N-1)/2}) & \cdots & C_{(N-1)/2,S,x}(x_{(N-1)/2}) \end{bmatrix}}_{\underline{\underline{D}}_S} \cdot \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_{(N-1)/2}) \end{bmatrix}, \tag{2.107}$$

ahol $\underline{\underline{D}}_S$ a szimmetrikus deriváló mátrix, melynek elemei az teljes deriváló mátrix elemeiből könnyen meghatározhatóak:

$$D_{S,i,j} = C_{i,S,x}(x_j) = (C_{i,x}(x_j) + C_{N-i}(x_j)). \tag{2.108}$$

Ezzel megkaptuk az origóra szimmetrikus (páros) függvény deriválására alkalmas mátrixot. Mivel páros függvényt deriválva páratlan derivált függvényt kapunk, ezért

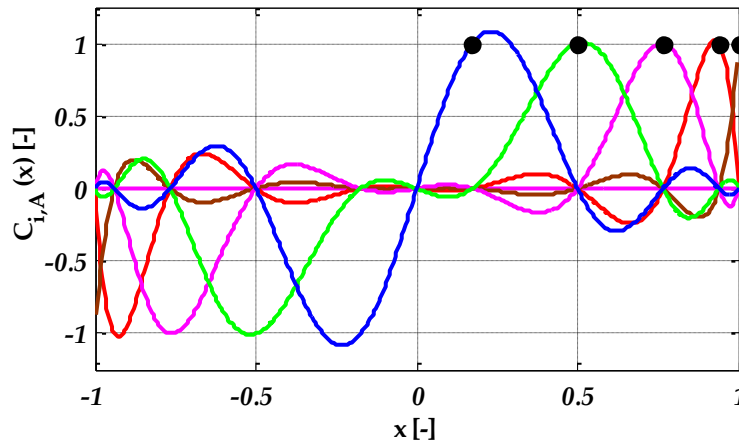
a magasabb rendű deriváltak meghatározásához szükség van egy olyan mátrixra is ami antiszimmetrikus (páratlan) függvények deriválására alkalmas. A levezetés hasonló az előbbiekhöz. Legyen $f(x)$ most páratlan függvény, ekkor a háló osztáspontjaiban vett függvényértékekre felírható, hogy:

$$f(x_i) = -f(-x_i) = -f(x_{N-i}). \quad (2.109)$$

A (2.103) egyenletben szereplő polinomot írjuk fel (2.109) segítségével:

$$\begin{aligned} P_N(x) &= \sum_{i=0}^{(N-1)/2} C_i(x) \cdot f(x_i) + C_{N-i}(x) \cdot f(x_{N-i}) = \\ &= \sum_{i=0}^{(N-1)/2} C_i(x) \cdot f(x_i) - C_{N-i}(x) \cdot f(x_i) = \sum_{i=0}^{(N-1)/2} C_{i,A}(x) \cdot f(x_i). \end{aligned} \quad (2.110)$$

ahol $C_{i,A}(x) = C_i(x) - C_{N-i}(x)$ antiszimmetrikus (páratlan) Lagrange féle karakterisztikus bázisfüggvény. A 2.11. ábrán öt pontra illesztett páratlan Lagrange féle karakterisztikus bázisfüggvényre látunk példát. A Lagrange bázisokat deriválva értékeit az osztáspontokban meghatározva, páratlan függvények deriválására alkalmas mátrixot kapunk.



2.11. Példa antiszimmetrikus Lagrange féle karakterisztikus bázisfüggvényre Extrema hálón

Írjuk fel a keresett páratlan függvény deriváltját az x_j osztáspontokban a páratlan Lagrange féle karakterisztikus bázisok segítségével:

$$f_x(x_j) \equiv P_{N,x}(x_j) = \sum_{i=0}^{(N-1)/2} f(x_i) \cdot C_{i,A,x}(x_j), \quad (2.111)$$

ezt mátrix alakban felírva:

$$\begin{bmatrix} f_x(x_0) \\ f_x(x_1) \\ \vdots \\ f_x(x_{(N-1)/2}) \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} C_{0,A,x}(x_0) & C_{1,A,x}(x_0) & \cdots & C_{(N-1)/2,A,x}(x_0) \\ C_{0,A,x}(x_1) & C_{1,A,x}(x_1) & \cdots & C_{(N-1)/2,A,x}(x_1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ C_{0,A,x}(x_{N/2}) & C_{1,A,x}(x_{N/2}) & \cdots & C_{(N-1)/2,A,x}(x_{(N-1)/2}) \end{bmatrix}}_{\substack{D \\ =A}} \cdot \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_{(N-1)/2}) \end{bmatrix}, \quad (2.112)$$

ahol $\underline{\underline{D}}_A$ az antiszimmerikus deriváló mátrix, mely páratlan függvények deriválására alkalmas. Elemei a teljes mátrix alapján könnyen számolhatók:

$$D_{A,i,j} = C_{i,A,x}(x_j) = C_{i,x}(x_j) - C_{N-i}(x_j) \quad (2.113)$$

A magasabb rendű deriváltak kiszámításához a mátrixokat megfelelő sorrendben alkalmazzuk, például ha $f(x)$ páros és legalább kétszer deriválható:

$$\underline{f}_{xx} = \underline{\underline{D}}_A \cdot \underline{\underline{D}}_S \cdot \underline{f}, \quad (2.114)$$

ha páratlan:

$$\underline{f}_{xx} = \underline{\underline{D}}_S \cdot \underline{\underline{D}}_A \cdot \underline{f}. \quad (2.115)$$

3. HŐVEZETÉS (PARABOLIKUS PARCIÁLIS DIFFERENCIÁL EGYENLET)

A hővezetési egyenlet egy dimenziós alakját már az 1.4. Fejezetben bemutattuk. A matematikai áttekintés során megállapítottuk, hogy peremfeltételtől függően választunk bázisfüggvény rendszert. Periodikus problémák esetén a legjobb választás a Fourier sor, nem periodikus problémák esetén célszerű Chebyshev polinomokat alkalmazni bázisfüggvényként. A következőkben az egy dimenziós hővezetési egyenleten keresztül mutatjuk be, hogyan alkalmazható a pseudo-spektrál módszer parciális differenciálegyenlet megoldására periodikus és nem periodikus problémák esetén. Majd összehasonlítjuk a különböző numerikus technikák konvergencia sebességét. Pontos megoldásnak az elegendően sok tagból álló analitikus megoldást tekintjük. Mivel jelenleg nem valós műszaki probléma megoldása a célunk, hanem a különböző numerikus módszerek, és azok előnyeinek és hátrányainak bemutatása, az egyszerűség kedvéért a számítások során dimenziótlan mennyiségekkel dolgozunk.

3.1. Nem periodikus peremfeltétel

Nem periodikus problémák esetén Boyd (2001) ajánlása alapján a legpontosabb eredményt Chebyshev polinom bázisfüggvények segítségével érhetjük el. A 2. Fejezetben bemutattuk, hogy minden bázisfüggvény rendszerhez tartozik két optimális háló. Ezek közül célszerű az „Extrema” hálót választani, mivel ekkor az első és utolsó kollokációs pont a számítási tartomány két végpontja, így egyszerű a peremfeltételek kezelése.

Első lépésben a megoldandó probléma számítási tartományát a $[0 \ L]$ intervallumról átskálázzuk a $[-1, \ 1]$ intervallumra, ahol L a rúd hossza.

A kollokációs pontok az:

$$x_j = \cos\left(\frac{\pi \cdot j}{N}\right) \quad j = 0, 1, \dots, N, \quad (3.1)$$

összefüggéssel meghatározhatók, ahol $-1 \leq x_j \leq 1$. A kezdeti időpillanatban ismert a hőmérséklet eloszlás (kezdeti feltétel, $u(x, 0) = f(x)$), ebbe az x_j pontokat behelyettesítve a függvény interpolációs pontokban vett diszkrét értékeit $u_j = f(x_j)$ megkapjuk. u_j továbbra is időfüggő, de az explicit időfüggés jelölést elhagyjuk. Az idő szerinti derivált kollokációs pontokban vett értékei egy mátrixszorzással előállíthatók:

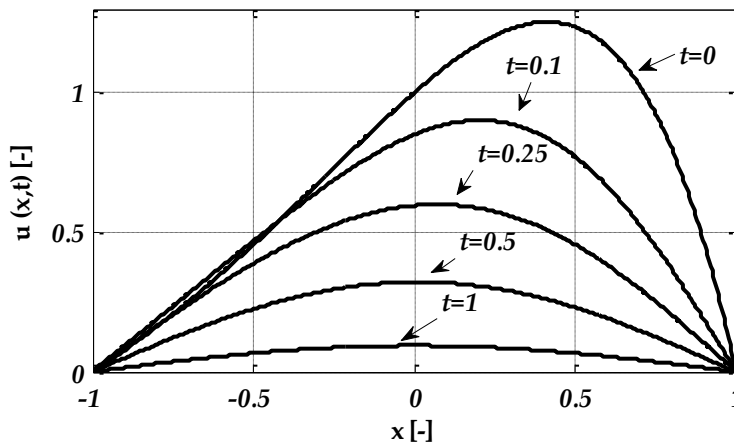
$$\underline{u}_t = \alpha^2 \cdot \underline{\underline{D}}^2 \cdot \underline{u}, \quad (3.2)$$

ahol $\underline{\underline{D}}$ az Appendix B.2.2. fejezetében az Extrema hálóra levezetett Chebyshev féle deriváló mátrix (B.59). Az $\underline{u}_t$ első és utolsó pontját ($u_{t,0}$ és $u_{t,N}$) valamint a deriváló mátrix első és utolsó sorát töröljük, így csak a belső pontokra kapunk $N-1$ db közös differenciálegyenletet. Kezdeti érték megoldó alkalmazásával (például: Runge – Kutta) a következő időszinten a belső pontokban a hőmérséklet értékek már

számolhatók. Mivel a derivált kiszámításához szükséges van a teljes u -ra a peremfeltételek $u_0 = T_0$ és $u_N = T_N$ behelyettesítésével az újabb időszinten előállítjuk a teljes hőmérséklet eloszlást. A kód felépítése teljesen analóg, mint az 1.4.2. fejezetben ismertetett másodrendű centrális differencia sémás megoldó kódja.

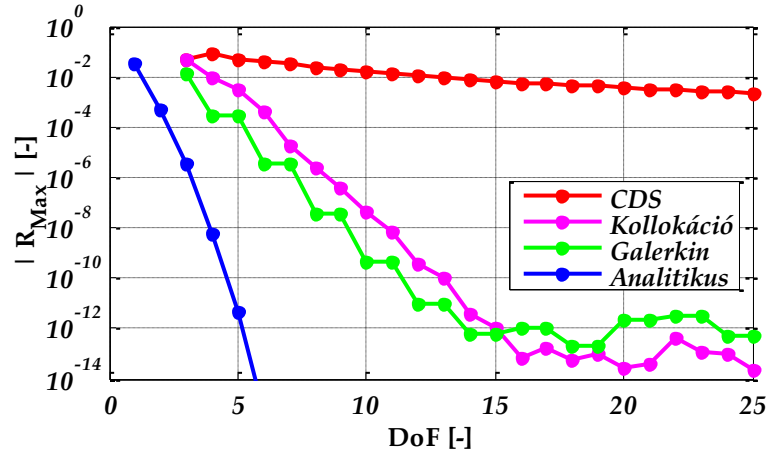
3.1.1. PÉLDA NEM PERIODIKUS PEREMRE

A kezdeti hőmérséklet eloszlás legyen $f(x) = -(x-1) \cdot (x+1) \cdot e^x$. Homogén nem periodikus peremfeltételeket alkalmazunk a rúd két végén $u_N = T(x=-1) = 0$ és $u_0 = T(x=1) = 0$. A rúd hossza $L=2$, a hőmérsékletvezetési tényező α egységnyi. Pontos megoldásnak a hővezetési egyenlet analitikus megoldását tekintjük ($N=400$ tagig véve), ami különböző időpillanatokban a 3.1. ábrán látható.



3.1. ábra: A hővezetési egyenlet megoldása $f(x) = -(x-1)(x+1)e^x$ kezdeti feltétel és $T(1) = T(-1) = 0$ homogén peremfeltétel esetén különböző időpillanatokban.

A konvergencia sebességét a $t = 0.25$ időpillanatban vizsgáljuk. Minden szabadsági fok mellett kiszámoljuk a numerikus sémákkal a differenciálegyenlet megoldását a vizsgált időpillanatban, majd meghatározzuk a numerikus séma egzakt megoldástól való eltérés (reziduum) abszolút maximum értékét. Ezt az eltérést ábrázoljuk a szabadsági fok („Degrees of Freedom”) függvényében, mely a 3.2. ábrán látható. A szabadsági fokot kollokációs és centrális differencia séma esetén az osztáspontok számával jellemezzük, Galerkin módszer esetén pedig az együtthatók számával. Analitikus megoldás esetén a szabadsági fokot a tagok száma jelöli.



3.2. ábra: A különböző numerikus módszerek és az analitikus megoldás konvergencia sebessége a nem periodikus peremfeltételre megoldott példa kapcsán $t=0.1$, időpillanatban

Az ábra alapján látható a spektrál módszer egyik legnagyobb előnye a differencia-sémákkal szemben. Sima függvények esetén már néhány szabadsági fok mellett is jóval nagyobb pontosság érhető el, mint ugyannyi szabadsági fokkal rendelkező differencia sémával. A diagramon megfigyelhető a spektrál módszerek konvergencia sebességére jellemző exponenciális gyorsaság. Az ábrából látható az is, amit az irodalmi bevezetőben már említettünk, a kollokációs módszer $N+1$ és $N+2$ szabadsági fok esetén éri el azt a pontosságot, amit a Galerkin már N esetén.

Az Appendix **Hiba! A hivatkozási forrás nem található.** fejezetében Matlab kód-részlet található a mely nem periodikus peremfeltétel esetén megoldja a hővezetési egyenlet kollokációs.

3.2. Periodikus peremfeltétel

Térben periodikus problémák esetén ($f(x)$ periodikus függvény) a bázisfüggvényként célszerű Fourier sort választani, és periodikus peremfeltétel $T(0)=T(2k\pi)$ alkalmazni, ahol k egész szám. A számítási tartományt ekkor a $[0, 2\pi]$ intervallumra skálázzuk át. A peremfeltételt Extrema háló alkalmazásával könnyű megadni, ilyenkor a kollokációs pontok egyenközűen helyezkednek el és:

$$x_j = \frac{2\pi \cdot j}{N} \quad j = 0, 1, \dots, N-1, \quad (3.3)$$

módon számolhatók, $0 \leq x_j < 2\pi$ és a számítási tartomány szélső pontja $x_0 = 0$, ahol előírjuk a peremfeltételt. A (3.4) összefüggés nevezőjében lévő N csak páros szám lehet, mivel ekkor kapunk 2π szerint periodikus függvényt (lásd: 2.7. ábra). Az Extrema háló miatt a bázisok első felírási módját (2.55) kell alkalmazni.

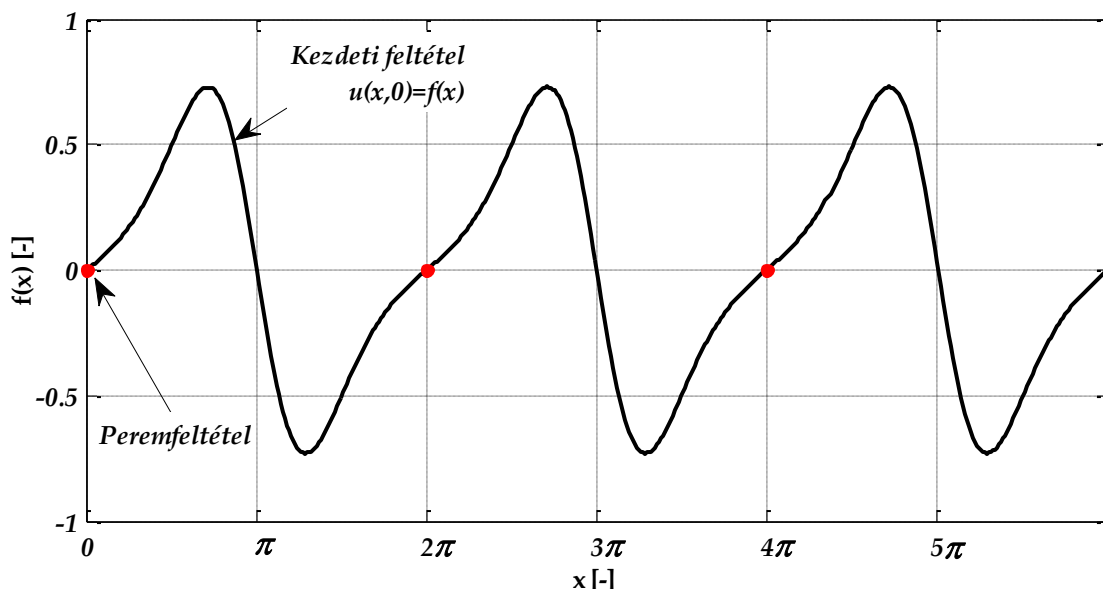
A megoldási módszer analóg a nem periodikus peremfeltételnél már bemutatottal. Az ismert kezdeti feltételbe x_j pontokat behelyettesítve diszkrétizáljuk az $u(x,0)$ függvényt. A hely szerinti deriválás itt is egy mátrix – vektorszorzássá egyszerűsödik:

$$\underline{u}_t = \alpha^2 \cdot \underline{\underline{D}}^2 \cdot \underline{u}, \quad (3.4)$$

ahol $\underline{\underline{D}}$ az Appendix B.1 fejezetében Extrema hálóra levezetett Fourier féle differenciáló mátrix melynek elemei a (B.8) alapján számolhatók. Az $u_{t,0}$ elemet és a mátrix első sorát töröljük, ezzel a parciális differenciálegyenlet a kollokációs pontokra felírt N db közönséges differenciálegyenletre bontottuk fel, amik kezdeti érték megoldóval már számolhatóak (ODE45). Az új időszinteken a szélső pontbeli függvényérték a peremfeltételből határozható meg $u_0 = u(x_0) = T(2k\pi)$.

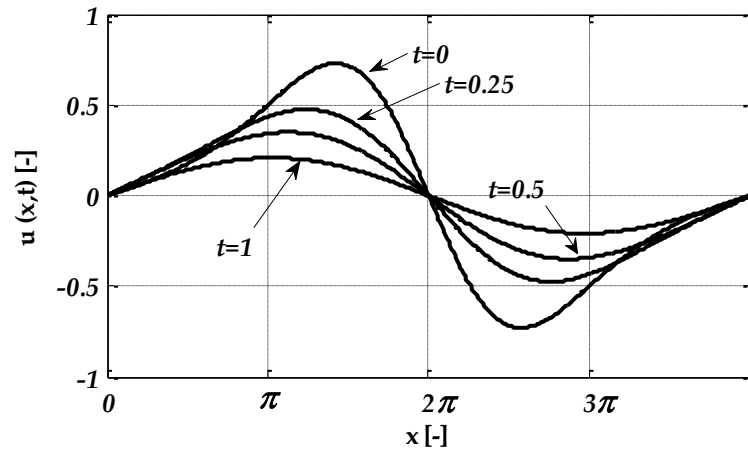
3.2.1. PÉLDA PERIODIKUS PEREMFELTÉTELRE

A kezdeti feltétel az $f(x) = 1/2 \cdot \sin(x) \cdot e^{-\cos(x)}$ 2π szerint periodikus függvény, melyet a 3.3. ábrán ábrázoltunk. A peremfeltétel szintén periodikus $T(2k\pi)$ $k = 0,1,2,...N$, amit az ábrán a piros pontokkal tüntettünk fel.



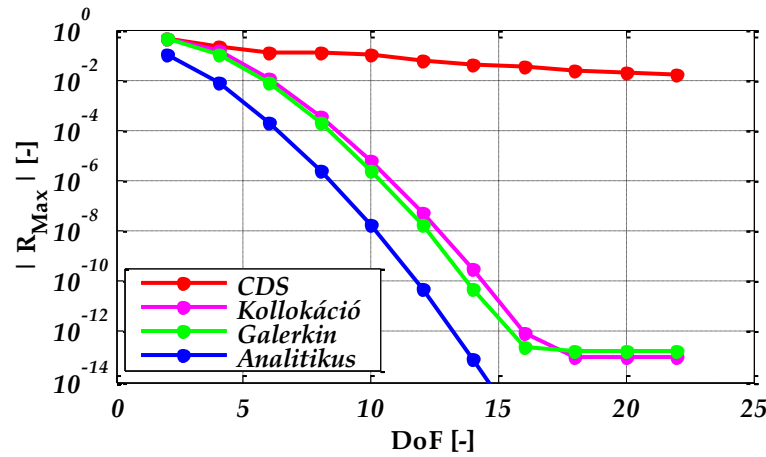
3.3. ábra: Példa periodikus kezdeti és peremfeltételre.

A rúd hossza $L = 2\pi$, a hőmérsékletvezetési tényező α egységnyi. Egzakt megoldásnak a 400 tagig kiszámított analitikus megoldást tekintjük, mely a 3.4. ábrán látható, különböző időpontokban. A vizsgált numerikus simák hibáját, ehhez viszonyítva határozzuk meg. A konvergencia sebességek összehasonlítását a $t = 0.25$ időpillanatban végezzük.



3.4. ábra: A hővezetési egyenlet megoldása $f(x) = 1/2 \cdot \sin(x) \cdot e^{-\cos(x)}$ periodikus kezdeti és $T(2k\pi) = 0$ periodikus peremfeltétel esetén különböző időpillanatokban.

A reziduum abszolút maximumát ábrázoljuk a szabadsági fok függvényében, mely a 3.5. ábrán látható.



3.5. ábra: A konvergencia sebességek összehasonlítása a periodikus peremfeltételű példa kapcsán a $t=0.25$ időpillanatban.

Az ábra alapján elmondható, hogy a leggyorsabban most is az analitikus megoldás konvergál, tehát tekinthető ez a pontos megoldásnak elegendően sok tagot véve. A numerikus megoldók konvergenciájában hasonló jellegzetességek figyelhetők meg, mint a nem periodikus esetben. A két spektrál módszer (Galerkin – zöld, és kollokációs – lila) néhány szabadsági fok esetén is jóval nagyobb pontosságot eredményez, mint a másodrendű centrális véges differenciálséma. A közönséges differenciálegyenleteket Matlab ODE45 megoldóval végeztük, melynek a relatív és abszolút toleranciáját 10^{-12} nagyságrendűnek állítottuk. A spektrál módszerek már 16 szabadsági fok körül elérik a 10^{-12} nagyságrendű hibát, míg a differencia séma estén a hiba 10^{-1} nagyságrend körüli érték.

Az Appendix **Hiba! A hivatkozási forrás nem található.** fejezetében a példa megoldására szolgáló Matlab kódrészlet olvasható.

4. HULLÁMEGYENLET (HIPERBOLIKUS PARCIÁLIS DIFFERENCIÁL EGYENLET)

A matematikában a második leggyakrabban előforduló parciális differenciálegyenlet a hullámeqyenlet. A jelenséget, amikor egy folytonos közegben valamilyen hullámok, például akusztikai hullámok, vízi hullámok, elektromágneses hullámok és szeizmikus hullámok terjednek, a hullámeqyenlettel írjuk le. A legegyszerűbben vizualizálható hullám a mechanikai rezgés. Gondoljunk egy vízszintesen kifeszített L hosszúságú rúdra, mint például egy gitárhúr. Az x tengely a rúd hossza mentén helyezkedjen el. Ha a rudat függőlegesen megrántjuk az a függőleges síkban rezegni kezd. A függőleges irányú elmozdulást x helyen t időpontban jelölje $u(x,t)$. Ha a csillapítást, és a légellenállást elhanyagoljuk az alábbi parciális differenciálegyenlet írható fel, lásd: Boyce (2012):

$$u_{tt} = \alpha^2 u_{xx} \quad 0 < x < L \quad t > 0, \quad (4.1)$$

amit a hullámeqyenlet egy dimenziós alakjának nevezünk. Az $u(x,t)$ függvény x szerinti második deriváltját u_{xx} és t szerinti második deriváltját u_{tt} jelöli. Az egyenletben szereplő konstans a hullámterjedési sebesség:

$$\alpha = \sqrt{\frac{T}{\rho}}, \quad (4.2)$$

ahol: T a húzóerő, ρ a húr anyagának sűrűsége. Azért, hogy a húr mozgását pontosan leírjuk, meg kell határoznunk a perem- illetve a kezdeti feltételeket. Ha a rúd végeit fixen vesszük fel, akkor a peremfeltételek:

$$u(0,t) = 0 \quad u(L,t) = 0 \quad t \geq 0. \quad (4.3)$$

Mivel a (4.1) egyenlet egy másodrendű differenciálegyenlet, ezért két kezdeti feltételt szükséges előírnunk, a rúd kezdeti pozícióját:

$$u(x,0) = f(x) \quad 0 \leq x \leq L, \quad (4.4)$$

és kezdeti sebességét:

$$u_t(x,0) = g(x) \quad 0 \leq x \leq L, \quad (4.5)$$

ahol $f(x)$ és $g(x)$ ismert függvények. A (4.3) (4.4) és (4.5) egyenletből következik, hogy:

$$f(0) = f(L) = 0 \quad g(0) = g(L) = 0. \quad (4.6)$$

4.1. Analitikus megoldás

4.1.1. RUGALMAS RÚD NEM NULLA KEZDETI ELMOZDULÁSSAL

A rudat kitérítjük az egyensúlyi helyzetéből, majd $t = 0$ időpillanatban elengedjük nulla kezdeti sebességgel és hagyjuk szabadon rezegni. A hullámegyenlet megoldása $u(x, t)$ ki kell, hogy elégítse a kezdeti- és a peremfeltételeket:

$$u_{tt} = \alpha^2 u_{xx} \quad u(0, t) = u(L, t) = 0 \quad u(x, 0) = f(x) \quad u_t(x, 0) = g(x) = 0. \quad (4.7)$$

A változók szétválasztásának módszerével, Boyce (2012) alapján az analitikus megoldás az alábbi végtelen sor alakban írható fel:

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n u_n(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \cdot \cos\left(\frac{n\pi \cdot \alpha \cdot t}{L}\right), \quad (4.8)$$

ahol a_n az $f(x)$ függvény szinuszos Fourier sorának együtthatója:

$$a_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.9)$$

4.1.2. RUGALMAS RÚD NEM NULLA KEZDETI SEBESSÉGGEL

Módosítsunk az előző eseten úgy, hogy a rudat az egyensúlyi pozíciójában egy kezdeti sebességgel hozzuk mozgásba $t = 0$ időpillanatban. A megoldandó probléma a következő:

$$u_{tt} = \alpha^2 u_{xx} \quad u(0, t) = u(L, t) = 0 \quad u(x, 0) = f(x) = 0 \quad u_t(x, 0) = g(x). \quad (4.10)$$

Az analitikus megoldást most is a változók szétválasztásának módszerével kapjuk meg, lásd Boyce (2012):

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n u_n(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \cdot \sin\left(\frac{n\pi \cdot \alpha \cdot t}{L}\right). \quad (4.11)$$

Azért, hogy meghatározzuk a b_n együtthatót a (4.11) egyenletet deriváljuk t szerint, és $t = 0$ időpillanatban vesszük a helyettesítési értékét, majd felhasználjuk a sebességre vonatkozó kezdeti feltételt:

$$u_t(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{n\pi \cdot \alpha}{L}\right) \cdot b_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = g(x). \quad (4.12)$$

Az $(n\pi \cdot \alpha / L) \cdot b_n$ mennyiség a $g(x)$ függvény szinuszos Fourier sorának együtthatója, melyből a b_n már kifejezhető:

$$\frac{n\pi \cdot \alpha}{L} b_n = \frac{2}{L} \int_0^L g(x) \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.13)$$

4.1.3. RUGALMAS RÚD ÁLTALÁNOS ESET

Általános esetben a $t=0$ időpillanatban egyik kezdeti feltételre vonatkozó függvény sem nulla, ekkor a megoldandó probléma az alábbi:

$$u_{tt} = \alpha^2 u_{xx} \quad u(0,t) = u(L,t) = 0 \quad u(x,0) = f(x) \quad u_t(x,0) = g(x). \quad (4.14)$$

Habár a változók szétválasztásának módszerével most is megoldható a feladat, a szuperpozíció elvét kihasználva egyszerűbb módon is eljuthatunk a megoldáshoz, ha az előző két eset megoldásaként kapott függvénysorokat összegezzük. Legyen $v(x,t)$ az $f(x) \neq 0$ és $g(x) = 0$, $w(x,t)$ pedig $f(x) = 0$ és $g(x) \neq 0$ eset megoldása. Előbbi a (4.8) utóbbi a (4.11) egyenlet alapján számolható. Az általános megoldás a kettő összegeként írható fel:

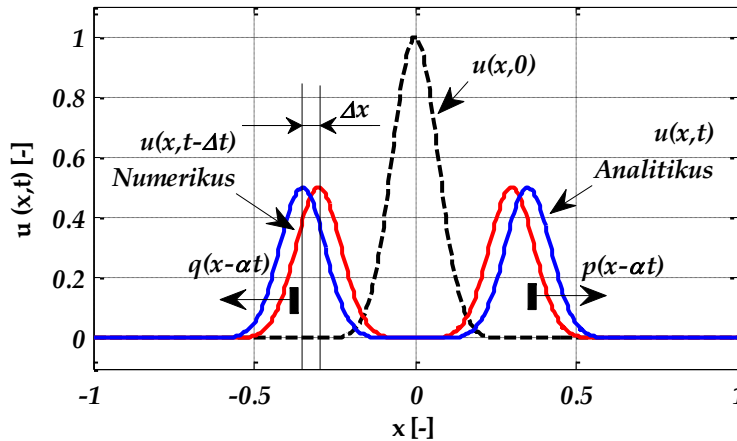
$$u(x,t) = v(x,t) + w(x,t) \quad (4.15)$$

4.2. A fáziskésés szemléltetése

A hullámegyenlet megoldása felírható egy jobbra és egy balra haladó hullám összegeként is:

$$u(x,t) = p(x - \alpha t) + q(x + \alpha t), \quad (4.16)$$

ahol $p(x - \alpha t)$ balról jobbra, $q(x + \alpha t)$ jobbról balra haladó (hullám) függvény. Ez az általános megoldás egyenértékű a fentebb bemutatott rezgő húrra kapott megoldással. Ennek igazolását lásd Boyce (2011). A haladó hullámokat a 4.1. ábrán szemléltettük. A kezdeti időpillanatban a függvény alakját (kezdeti feltétel az elmozdulásra $f(x)$) a szaggatott fekete görbe jelöli az ábrán. A kezdeti időpillanatban a sebesség (második kezdeti feltétel $g(x)$) nulla volt.



4.1. ábra: A fáziskésés bemutatása. A hullám alakját a kezdeti időpillanatban a fekete szaggatott, a t időpontbeli analitikus megoldást zöld, a numerikus megoldás piros színű görbe jelöli.

Az ábrán t időpontban ábrázoltuk az analitikus és egy numerikus megoldást a zöld és piros színnel. Az ábra természetesen eltúlzott, de a fáziskésés bemutatása

szempontjából jellegre helyes mindkét (másodrendű centrális differencia séma, spektrál módszer) vizsgált numerikus módszer esetén. A numerikus megoldás „le-marad” az analitikus (egzakt) megoldáshoz képest. A lemaradás mértéke Δx leolvasható a maximum értékek helyzetéből. A hullámterjedési sebesség α egységnyi, a numerikus megoldások időbeli eltolódása:

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{\alpha} \quad (4.17)$$

Szakirodalom alapján a spektrál módszerek másik nagy előnye a differenciasémákkal szemben a fázistartás, azaz nem tolódnak el időben a pontos megoldáshoz képest, míg a differencia sémák fázistartása rosszabb. A fázishiba kumulatív, tehát a periódusonkénti fázishiba összeadódik, ezért az olyan módszer, ami néhány százaléknyi fázishibát is megenged több periódusnyi számítás után hibás végeredményhez vezet. A konvergencia tulajdonságok mellett a numerikus sémák e jellegzetességét szemléltetjük nem periodikus és periodikus peremfeltételek esetén.

A 3. Fejezetben az összehasonlításban a Galerkin módszer (klasszikus spektrál) is szerepelt. A hullámterjedés kapcsán olyan nagy felbontást (sok szabadsági fok) alkalmaztunk, ahol a Galerkin módszer számítási ideje jelentősen megnőtt, a folytonos integrálokat tartalmazó mátrixok miatt. A továbbiakban ezt a módszert elhagyjuk, csak a pszeudó spektrál módszert és a másodrendű centrális differencia sémát vizsgáljuk.

4.3. Nem periodikus peremfeltétel

A megoldási módszer hasonló a hővezetés kapcsán már bemutatotthoz. A számítás tartomány a $[-1, 1]$ intervallum. Extrema hálót alkalmazunk, ekkor a háló első és utolsó eleme a számítási tartomány két szélső pontja, így egyszerű a peremfeltétel kezelése. A diszkretizálás utána a hely szerinti deriválás egy mátrix szorzássá egyszerűsödik, ezért a hullámegyenlet (4.1) az alábbi formában írható:

$$\underline{u}_{tt} = \underline{D}^2 \cdot \underline{u}, \quad (4.18)$$

ahol $\underline{D}$ az Extrema hálóra levezetett deriváló mátrix (B.59). Mivel a két szélső pontban a hőmérsékletet a peremfeltételből határozzuk meg ezért csak a belső pontokba kell $N-1$ db közönséges differenciálegyenletet kapnunk. A deriváláshoz a teljes $\underline{u}$ és $\underline{u}_t$ függvényt ismernünk kell. Az idő szerinti első derivált:

$$\underline{u}_t = \underline{D} \cdot \underline{u}, \quad (4.19)$$

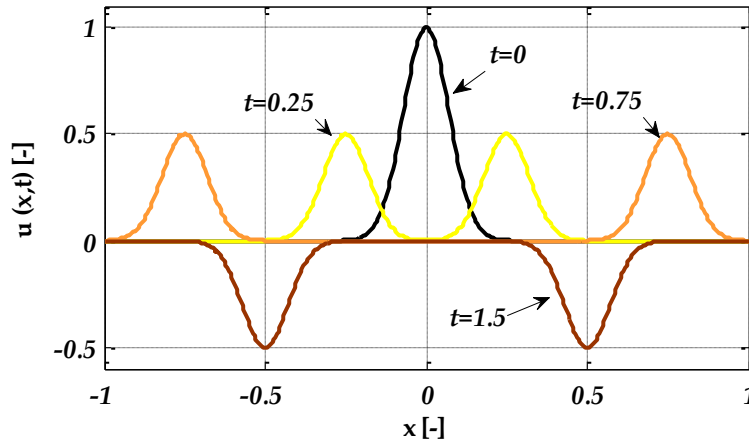
Az idő szerinti második deriváltat csak az $i=1,2,\dots,N-1$ pontban határozzuk meg:

$$\underline{u}_{tt}^{**} = \underline{D}^{**} \cdot \underline{u}_t = \underline{D}^{**} \cdot \underline{D} \cdot \underline{u} \quad (4.20)$$

ahol a $**$ jelzi, hogy az első és utolsó elem/sor törölve van. A belső pontokra kapott közönséges differenciálegyenletet ODE45 alkalmazásával oldjuk meg, majd az új időszinten a peremfeltételekből szélső pontokban is meghatározzuk az u_0 és u_N értéket.

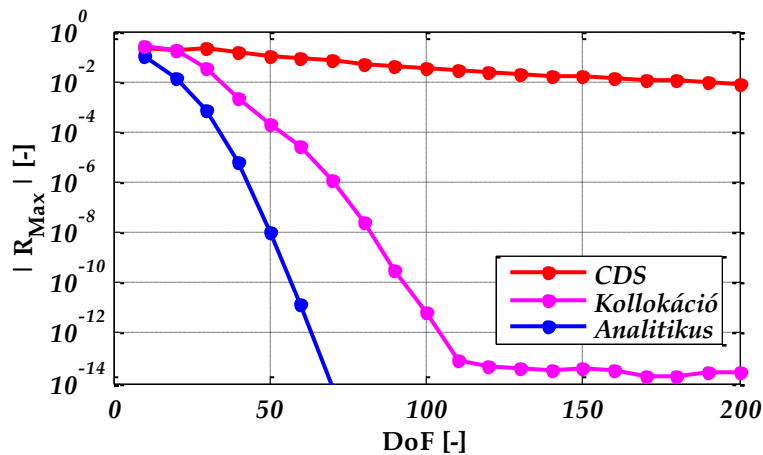
4.3.1. PÉLDA NEM PERIODIKUS PEREMRE

Oldjuk meg az egy dimenziós hullámegyenletet a $f(x) = (-1) \cdot (x-1) \cdot (x+1) \cdot e^{-100x^2}$ és $g(x) = 0$ kezdeti feltétel esetén. A rúd végei legyenek fixek (homogén nem periodikus peremfeltétel) tehát $u(-1,t) = u(1,t) = 0$ és $u_x(-1,t) = u_x(1,t) = 0$. A rúd hossza $L = 2$ $\alpha = 1$ dimenziótlan mennyiségek. Az analitikus megoldás különböző időpillanatokban a 4.2. ábrán látható. A kezdeti időpillanatban két függvény indul el a tartomány szélei felé, a peremet elérve a hullám a negatív oldalon visszaverődik majd a szél felől halad a közepe felé. 4 időegység alatt a megoldás visszatért a kiinduló állapotba, tehát periódusidő $T = 4$.



4.2. ábra: A hullámegyenlet megoldás homogén nulla nem periodikus peremfeltételek és $f(x) = (-1) \cdot (x-1) \cdot (x+1) \cdot e^{-100x^2}$, $g(x) = 0$ kezdeti feltételek esetén.

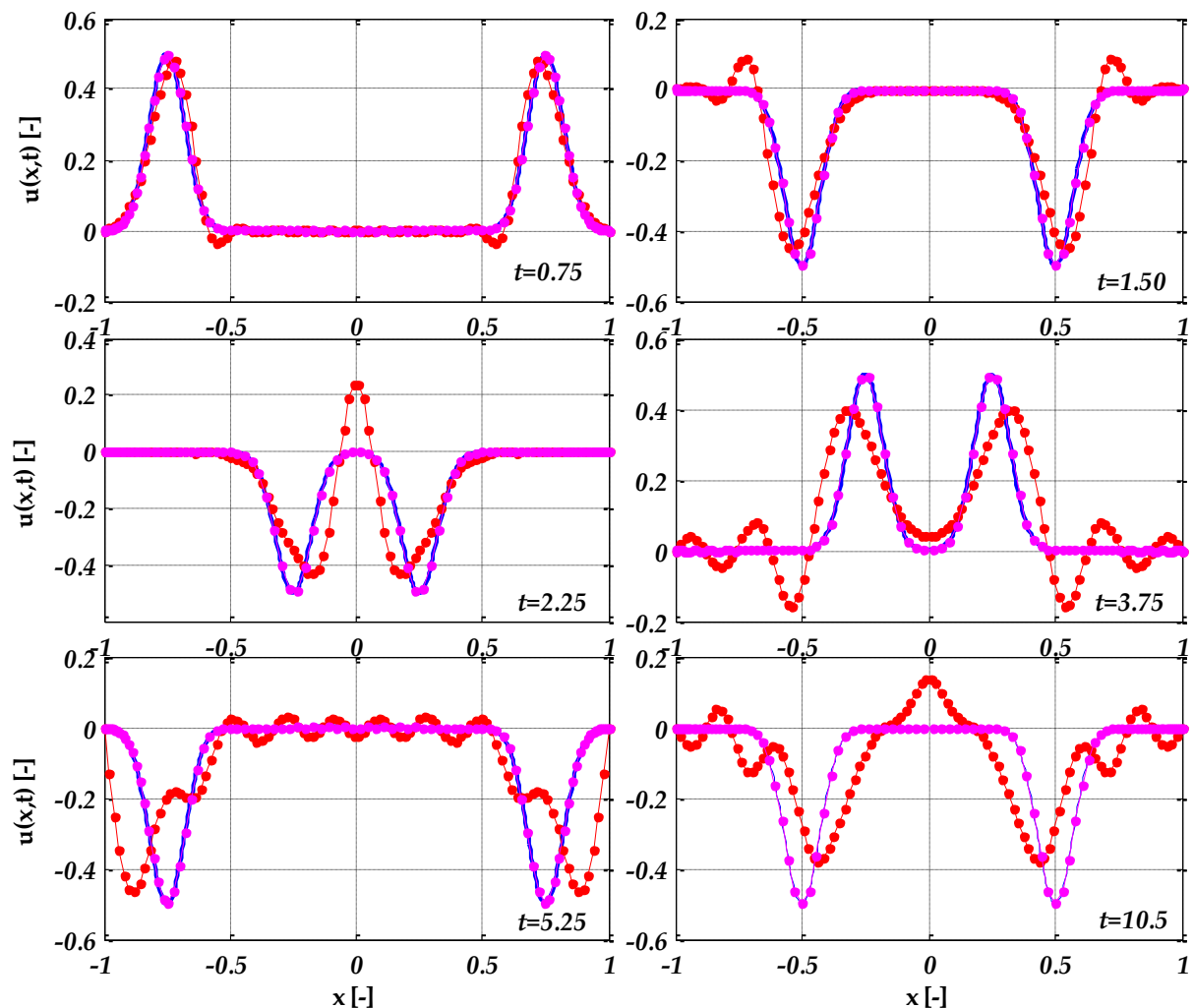
Először vizsgáljuk a konvergencia sebességeket a $t = 0.25$ időpillanatban. Egzakt megoldásnak most is a 400 tagig vett analitikus megoldást tekintjük. Ehhez képest ábrázoljuk a numerikus módszerek eltérését a 4.3. ábrán. Az ábrán az analitikus megoldás konvergencia sebességét is feltüntettük.



4.3. ábra: A különböző megoldási sémák konvergencia sebességeinek összehasonlítása a nem periodikus peremfeltételre bemutatott példa alapján $t=0.25$ időpontban.

Az ábra alapján hasonló dolgokat tapasztalunk, mint a hővezetés kapcsán. A spektrál kollokációs módszer konvergencia sebessége lényegesen nagyobb, mint a másodrendű centrális differencia sémáé, habár lényegesen több szabadsági fok szükséges a függvény pontos leírásához, mint a hővezetési egyenletnél láttuk. Ha a szabadsági fok elérte a 110-et a spektrál megoldó pontossága nem javul tovább, mivel elérte az ODE megoldón beállított 10^{-12} nagyságrendű toleranciát. Az ábrából látható az is, hogy az analitikus megoldás konvergál a leggyorsabban önmagához képest, így tekinthető ez a legpontosabbnak.

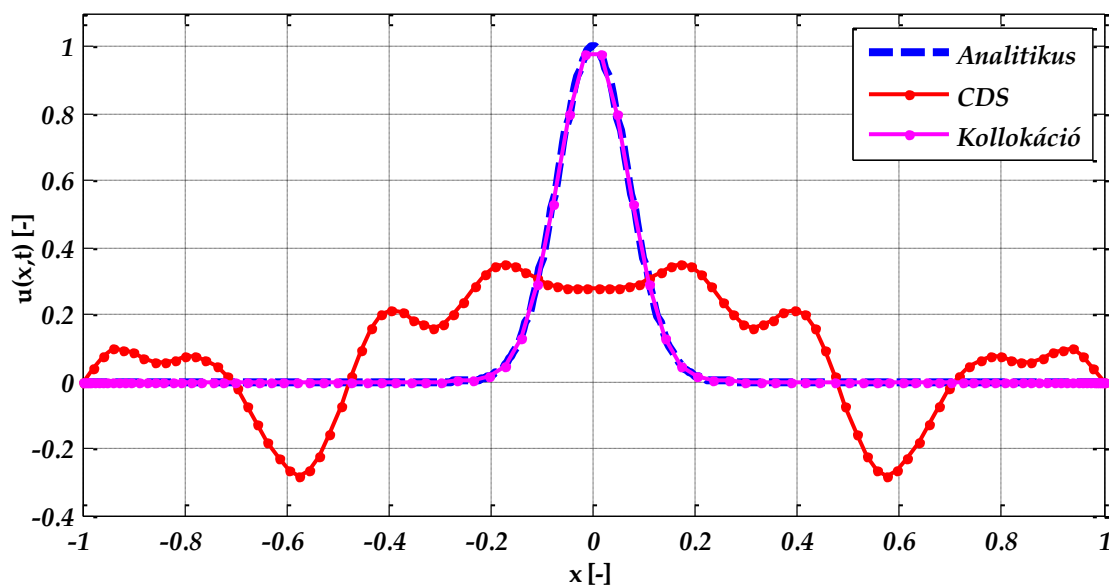
A másik vizsgált jelenség a fázistartást, ezt a 4.4. ábrán szemléltetjük. 100 szabadsági fok esetén ábrázoljuk a két különböző numerikus sémával kapott megoldást különböző időpillanatokban. A piros a másodrendű centrális differencia sémával a lila a spektrál kollokációs módszerrel kapott eredmény. Késsel az analitikus megoldást is feltüntettük.



4.4. ábra: A fázistartás szemléltetése a nem periodikus példa kapcsán, különböző időpontokban. A szabadsági fokok száma mindkét numerikus séma esetén DoF=100. Az analitikus kék, a másodrendű centrális differencia séma piros, a kollokációs módszerrel kapott megoldás lila színnel jelölt.

Az ábra alapján jól látható, hogy az analitikus (kék) és a kollokációs (lila) módszerrel kapott megoldások vonalvastagságon belül fedik egymást mind a hat időpillanatban, tehát a kollokációs módszer fázisstartása jónak bizonyul. A centrális differencia séma (piros) ezzel szemben már $t = 1.5$ időpillanatban elcsúszik az egzakt megoldáshoz képest, majd az idő előre halad tával a megoldás egyre inkább elkenődik.

A 4.5. ábrán 10 periódus eltelte után, $t = 40$ időpillanatban ábrázoltuk a megoldásokat 100 szabadsági fok esetén. A diagramból jól látható, hogy a kollokációs módszer (lila) még mindig jól illeszkedik az analitikus (kék) megoldásra, viszont a másodrendű centrális differencia sémával kapott megoldás már hibás, itt már nincs értelme fáziskésésről beszélni, mivel a teljes megoldás elkenődött.



4.5. ábra: A hullámegyenlet megoldás a $t=40$ időpillanatban

4.4. Periodikus peremfeltétel

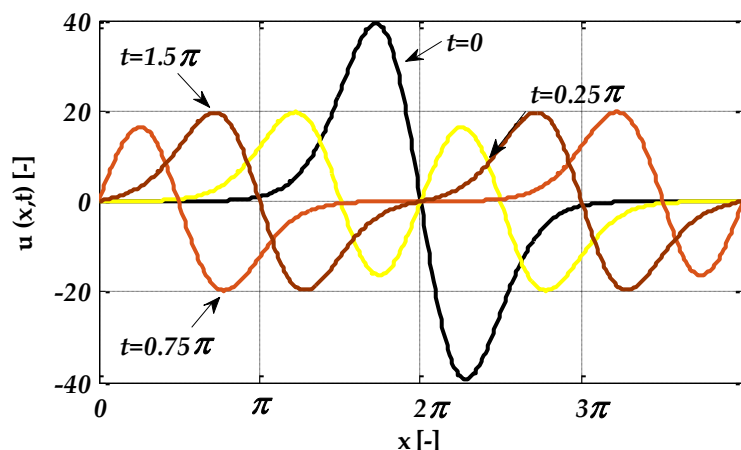
Periodikus peremfeltétel esetén Fourier bázist célszerű használni. Az Extrema hátulót alkalmazzuk most is, mivel így egyszerű peremfeltétel kezelése. A számítási tartomány ekkor a $[0 \ 2\pi]$ intervallum. A belső pontokra szeretnénk differenciálegyenletet kapni, összesen $N - 1$ darabot, úgy, hogy az $\underline{u}_{tt}$ első elemét $u_{tt,0}$ elhagyjuk. A hullámegyenlet (4.1) a nem periodikus peremfeltételes példánál látottakhoz hasonlóan írható:

$$\underline{u}_{tt}^* = \underline{D}^* \cdot \underline{D} \cdot \underline{u}, \quad (4.21)$$

ahol $\underline{D}$ a Fourier bázisokra levezetett deriváló mátrix (B.8), és a $*$ az első sor törlését jelöli. A kód a korábbiakhoz hasonlóan működik, a belső pontokban közönséges differenciálegyenlet megoldóval számítjuk ki a következő időszinten az ismeretlen $\underline{u}$ értékeit, majd a szélső pontban meghatározzuk u_0 -t a peremfeltételből, így a teljes $\underline{u}$ előáll.

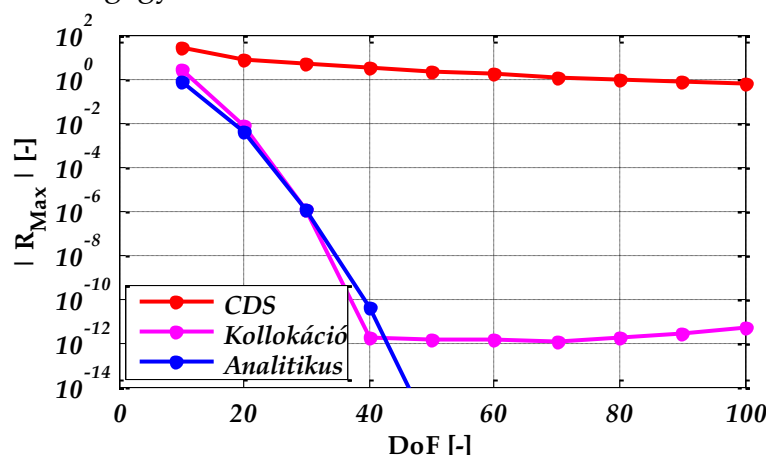
4.4.1. PÉLDA NEM PERIODIKUS PEREMFELTÉTELRE

Legyen a kezdeti feltétel $f(x) = \sin(x) \cdot e^{-5 \cdot \cos(x)}$ 2π szerint periodikus függvény és $g(x) = 0$. Periodikus peremfeltétel alkalmazunk $u_0 = u(2k\pi) = 0 \quad k = 0, 1, 2, \dots, N$. Pontos megoldásnak a 400 tagig vett analitikus megoldást tekintjük, melyet néhány különböző időpillanatban ábrázoltunk a 4.6. ábrán. A megoldás periódusideje $T = 2\pi$, azaz a hullám ennyi időegység eltelte után tér vissza a kiindulási állapotba.



4.6. ábra: A hullámegyenlet megoldás nulla periodikus peremfeltételek és $f(x) = \sin(x)e^{-5 \cdot \cos(x)}$ és $g(x) = 0$ kezdeti feltételek esetén.

Először a $t = 0.25\pi$ időpillanatban vizsgáljuk a különböző megoldási sémák konvergencia sebességét, ami a 4.7. ábrán látható. A már többször látott jelleget tapasztaljuk a centrális differencia séma lassan, míg a kollokációs módszer gyorsabban konvergál. Érdekes megemlíteni, hogy az analitikus megoldás konvergencia sebessége jó közelítéssel megegyezik a kollokációs módszerével.

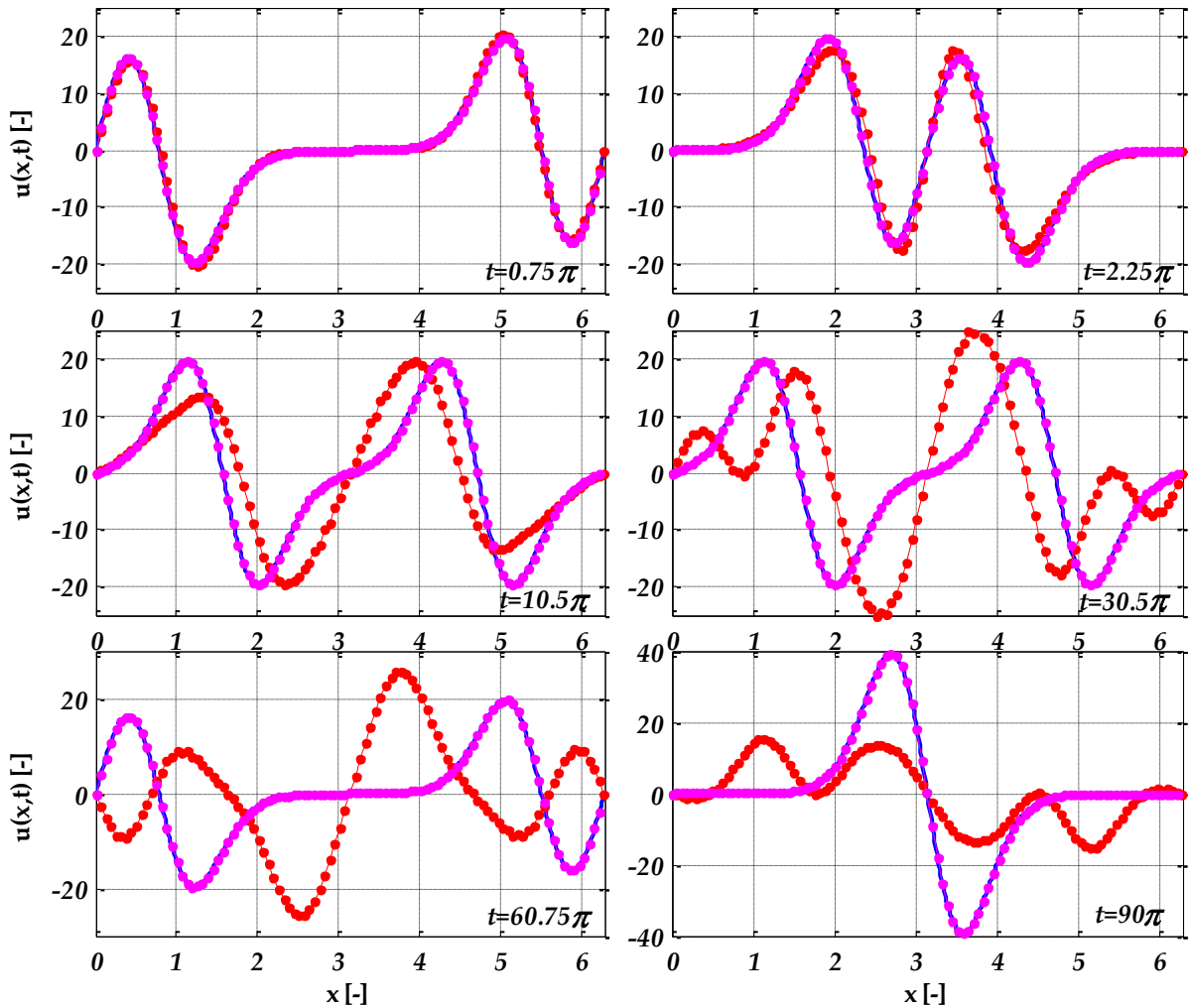


4.7. ábra: A különböző megoldási sémák konvergencia sebességeinek összehasonlítása a periodikus peremfeltételre bemutatott példa alapján $t=0.25\pi$ időpontban

Ez egy szemléletes példa arra, hogy az analitikus megoldás is tekinthető a spektrál módszer egy speciális esetének, ahol a bázisfüggvények a Fourier sor szinuszos tagjai. Ha megnézzük a kezdeti feltételt belátható, hogy az $f(x)$ függvény $x=0$ -ra és

$x = \pi/2$ -re nézve is páratlan. Ha megnézzük a 2.1. táblázatot, láthatjuk, hogy ilyen szimmetria tulajdonságokkal csak a $\sin(2nx)$ bázisok rendelkeznek, a Fourier bázis-rendszer többi tagjának együtthatója nulla, így az analitikus megoldást kapjuk vissza. Ameddig az ODE megoldó toleranciáját el nem érjük a spektrál módszer képes az analitikus megoldás pontosságát tartani.

A másik vizsgált jelenség periodikus perem esetén is a fáziskésés. Ez szemléltetjük a 4.8. ábrán, mindkét megoldó esetében DoF = 100 szabadsági fokot alkalmazva. Jól megfigyelhető, hogy ahogy lépünk előre az időben, a centrális differenciaséma (piros) fokozatosan késik az analitikus megoldáshoz képest, és egyre inkább torzul a megoldás. Eközben a kollokációs módszerrel (lila) kapott megoldás és az analitikus megoldás (kék) görbék fedik egymást, még egy késő $t = 90\pi$ időpillanatban is. Az ábra jól szemlélteti a spektrál módszer jó fázistartó tulajdonságát.



4.8. ábra: A fázistartás szemléltetése a periodikus példa kapcsán, különböző időpontokban. A szabadsági fokok száma mindkét numerikus séma esetén DoF=100. Az analitikus kék, a másodrendű centrális differencia séma piros, a kollokációs módszerrel kapott megoldás lila színnel jelölt.

5. BUBORÉKMODELL

Az áramlástechnikai gépekben és rendszerekben jól ismert jelenség a kavitáció. Egy kezdetben nagy átmérőjű buborék a folyadék tehetetlenségének következtében hirtelen összezsugorodik, ami nagy buborék fal sebességet eredményez. A sebesség meghaladhatja a folyadékbeli hangsebességet vagy akár annak a többszörösét is, miközben az átmérő több nagyságrendet is csökkenhet. Ezt a folyamatot buborék összeroppanásnak nevezzük. Az összeroppanás pillanatában a maximális nyomás elérheti az 1000 bar-t a maximális hőmérséklet pedig a 8000 K-t (lásd: Brennen (1995)). Az említett extrém körülmények az áramlástechnikai rendszerek és gépek súlyos roncsolódását eredményezik.

A kavitáció folyamatának megértéséhez jó segítséget nyújthatnak az egyetlen gömbszimmetrikus buborék numerikus vizsgálata során kapott eredmények. Hegedűs et al (2013) két különböző buborékmodell (Rayleigh – Plesset, Keller – Miksis) validációját végezte. Az alkalmazott modellek leírják a buboréksugár lengését, valamint a hőmérséklet mező változását a buborék belsejében és a buborékon kívül. A cikkben a hőmérsékletmezőt leíró parciális differenciálegyenletek (energiaegyenlet) megoldásához másodrendű centrális differencia sémát alkalmaztak.

A dolgozat e fejezetének a célja, a cikkben használt modell módosítása, a differencia séma helyett spektrál kollokációs módszert alkalmazva. A példa kapcsán bemutatjuk a szimmetriák kihasználásának lehetőségét és a peremfeltételeket kezelését is.

5.1. Matematikai modell

5.1.1. BUBORÉK LENGÉSÉT LEÍRÓ EGYENLET

Hegedűs et al. (2013) alapján láthatjuk, hogy az ott szereplő modellek közül a Keller – Miksis (Keller és Miksis (1980)) alkalmazásával pontosabb eredmények érhetők el, ezért mi is ezzel dolgozunk. A modell figyelembe veszi a folyadék összenyomhatóságát, ami a lehetséges nagy buborékfal sebesség következménye. Az eredeti egyenletben megjelenő időkésés elkerülése érdekében Lauterborn és Kruz (2010) nyomán az egyenlet egy módosított formáját alkalmazzuk:

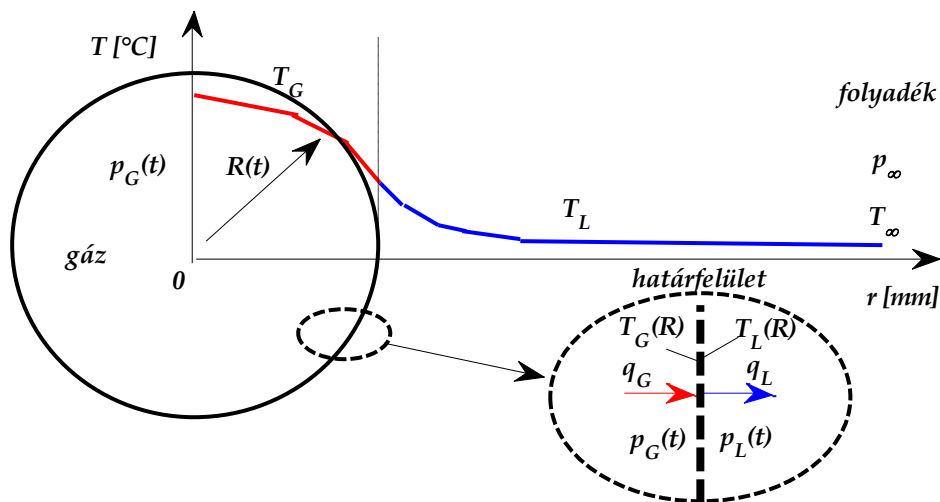
$$\left(1 - \frac{\dot{R}}{c_L}\right) R \ddot{R} + \left(1 - \frac{\dot{R}}{3c_L}\right) \frac{3}{2} \dot{R}^2 = \left(1 + \frac{\dot{R}}{c_L} + \frac{R}{c_L} \frac{d}{dt}\right) \frac{(p_L - p_\infty)}{\rho_L} \quad (5.1)$$

ahol: $R(t)$ az időfüggő buboréksugár, c_L a folyadék hangsebessége, ρ_L a folyadék sűrűsége, p_∞ pedig a buboréktól távoli nyomás a folyadéktérben. A kémiaiilag tiszta anyagok összes anyagjellemzője nyomástól és hőmérséklettől függ. A buborék dinamikáját glicerín közegben vizsgáljuk, melynek anyagjellemzői csak a hőmérséklettől

függnek, a nyomásfüggést elhanyagoljuk. A glicerín anyagjellemzőit Dow Chemical Company¹ mérési eredményei alapján határoztuk meg.

5.1.2. A BUBORÉK BELSEJE (GÁZTÉR)

A buborék modell az 5.1. ábrán látható. A buborék belsejében lévő gázt ideálisnak feltételezzük. A buborékban lévő glicerín gőz mennyisége a gáz komponenshez képest elhanyagolható.



5.1. ábra: A buborékmodell

A belső nyomást térben állandónak és a gázt ideálisnak feltételezve a gáz sebességmező egy lehetséges közelítése (lásd: Prosperetti et al. (1988), Kamath és Prosperetti (1989), Hao és Prosperetti (1999), Hegedűs et al. (2013)):

$$u_G = \frac{1}{\kappa \cdot p_G} \left((\kappa - 1) \cdot \lambda_G \frac{\partial T_G}{\partial r} - \frac{1}{3} r \cdot \dot{p}_G \right), \quad (5.2)$$

ahol r a sugár irányú koordináta, κ a fajhőviszony, p_G a gáznyomás, λ_G a gáz hővezetési tényezője, T_G a gáztéri hőmérséklet mező. Megjegyzendő, hogy a gáznyomás időben változik, de térben állandó. Ha a párolgást és a kondenzációt a buborék felületén elhanyagoljuk, gáz sebessége a buborékfalnál egyenlő a buborékfal sebességével $u_G(R, t) = \dot{R}$. Ezzel a feltételezéssel (5.2) egyenletet rendezve a gáznyomásra egy közös differenciálegyenletet kapunk:

$$\dot{p}_G = \frac{3}{R} \left((\kappa - 1) \cdot \lambda_G \frac{\partial T_G}{\partial r} \Big|_R - \kappa \cdot p_G \cdot \dot{R} \right). \quad (5.3)$$

A gáz hőmérsékletmező az energiaegyenlet megoldásával határozható meg.

¹ www.dow.com

A fentebbi feltételezések és (5.2) (5.3) egyenletek felhasználásával az energiaegyenlet az alábbi formában írható fel (lásd: Prosperetti et al. (1988):

$$\frac{\kappa}{\kappa-1} \frac{p_G}{T_G} \left(\frac{\partial T_G}{\partial t} + u_G \frac{\partial T_G}{\partial r} \right) = \dot{p}_G + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_G r^2 \frac{\partial T_G}{\partial r} \right). \quad (5.4)$$

(5.2)-(5.4) teljesen leírja a gáz viselkedését a buborék belsejében. Az egyenletekben megjelenő κ fajhőviszony és λ_G hővezetési tényező a buborék belsejében lévő gáz ismeretében határozható meg. Levegőt feltételezve Kamath és Prosperetti (1989) alapján, a fajhőviszony $\kappa=1.4$. Mivel a hőmérséklet néhány ezer Kelvin tartományban változik a hővezetési tényező hőmérséklet függését figyelembe kell venni. Lineáris függvénykapcsolatot írunk elő:

$$\lambda_G(T_G, r, t) = A \cdot T_G(r, t) + B, \quad (5.5)$$

ahol a konstansok: $A = 5.528 \cdot 10^{-5} \text{ W / (mK}^2\text{)}$, $B = 1160 \cdot 10^{-5} \text{ W / (mK)}$. Ezzel a hővezetési tényező 200 – 3000 K tartományban jól közelíthető.

5.1.3. A BUBORÉKTÓL TÁVOL (FOLYADÉKTÉR)

A buborék lengése során keletkező hő a buborék falon keresztül a folyadéktérbe vezetődik (lásd 5.1. ábra q_G , q_L). A hővezetési folyamatot leíró energiaegyenlet:

$$\rho_L \cdot c_{pL} \cdot \left(\frac{\partial T_L}{\partial t} + u_L \frac{\partial T_L}{\partial r} \right) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_L r^2 \frac{\partial T_L}{\partial r} \right), \quad (5.6)$$

ahol T_L a hőmérséklet mező a folyadéktérben, ρ_L a folyadék sűrűsége, λ_L a folyadék hővezetési tényezője, c_{pL} a folyadék állandó nyomáson vett fajhője, $u_L = \dot{R}/(R/r)^2$ a folyadéktér összenyomhatatlan sebességmezeje r térkoordinátánál. Az egyenletben szereplő anyagjellemzők a T_∞ hőmérséklet függvényeként határozhatók meg.

5.1.4. PEREMFELTÉTELEK

Azért, hogy a buborék viselkedését pontosan leírjuk, elő kell írunk a peremfeltételeket is. A buboréktól távol, a végtelenben a nyomás $p_\infty = P_\infty$ konstans. A buborékfal két oldalán lévő nyomások közötti kapcsolatot az alábbi impulzusegyensúly teremti meg:

$$p_G = p_L + \frac{2\sigma}{R} + 4\mu_L \frac{\dot{R}}{R}, \quad (5.7)$$

ahol σ a felületi feszültség, μ_L a folyadék viszkozitása, szintén hőmérsékletfüggő mennyiségek. A gáz és folyadék oldali hőmérséklet mező meghatározásához 4db peremfeltétel szükséges. A buborék belsejében szimmetrikus hőmérsékletmezőt tételezünk fel ezért:

$$\frac{\partial T_G(0, t)}{\partial r} = 0. \quad (5.8)$$

A buboréktól távol, a végtelenben a hőmérséklet konstans:

$$T_L(\infty, t) = T_\infty. \quad (5.9)$$

A buborék fal felületén a belső és külső oldalon lévő hőmérséklet megegyezik:

$$T_G(R, t) = T_L(R, t). \quad (5.10)$$

Az utolsó peremfeltétel a falon átadott hő mennyiség egyenlőségét fejezi ki $q_G = q_L$:

$$\lambda_G \frac{\partial T_G(R, t)}{\partial r} \Big|_R = \lambda_L \frac{\partial T_L(R, t)}{\partial r} \Big|_R. \quad (5.11)$$

5.2. A megoldandó közönséges differenciálegyenlet rendszer

5.2.1. A SZÁMÍTÁSI TARTOMÁNY

Annak érdekében, hogy a hőmérsékletmező spektrál módszerrel kiszámítható legyen szükséges egy olyan koordináta transzformáció, ami a parciális differenciál egyenletek (energiaegyenletek) számítási tartományát a $[-1, 1]$ tartományra skálázza át.

Mivel a buborék belsejében, $r = 0$ szimmetrikus peremfeltételt alkalmaztunk elegendő csak a $[0, 1]$ intervallumon számolnunk és a 2.4.1. fejezetben bemutatott módon felvenni az osztáspontokat, és a szimmetrikus, antiszimmetrikus deriváló mátrixokat megfelelő sorrendben alkalmazni. Az $y = r / R(t)$ koordináta transzformációval az $[0, R(t)]$ intervallumról a $[0, 1]$ számítási tartományra térünk át. A buborék belsejébe felírt energiaegyenlet koordináta transzformációja az Appendix C.1.1. fejezetében olvasható.

A végtelen és fél-végtelen terek kezelésére Boyd (2001) több ajánlást ad. Egyik lehetséges módszer a számítási tartomány levágása. A $[-\infty, \infty]$ vagy $[0, \infty]$ tartomány helyett a $[-L, L]$ vagy $[0, L]$ tartományon dolgozunk, ahol L elegendően nagy, hogy végtelennek tekinthessük. A másik lehetséges módszer alternatív bázisfüggvény választás, pl: végtelen térek esetére: sinc, Hermite függvények; félvégtelen térre: Laguerre polinom. A harmadik lehetséges módszer egy olyan koordináta transzformáció, ami a végtelen teret egy véges térre képezi le. A végtelenben szimmetriát feltételezve (T_L a végtelenben lecseng, a derivált $dT_L / dr = 0$) $z = R(t) / r$ transzformációval a számítási tartomány $[R(t), \infty]$ tartományról az $[1, 0]$ intervallumra változik. A folyadéktérre felírt energiaegyenlet koordináta transzformációja az Appendix 0. fejezetében található.

5.2.2. A DIMENZIÓTLAN EGYENLETRENDSZER

A modell változóit alkalmasan megválasztott referencia mennyiségekkel dimenziótlanjuk: $t = \tau \cdot t_{ref}$, $R = x_1 \cdot R_{ref}$, $\dot{R} = x_2 \cdot \dot{R}_{ref}$, $p_G = x_3 \cdot p_{Gref}$, $T_G = \tilde{T}_G \cdot T_{ref}$, $T_L = \tilde{T}_L \cdot T_{ref}$. Az (5.1) Keller – Miksis egyenlet felírható, két elsőrendű közönséges differenciálegyenletként, a referencia mennyiségeket felhasználva a differenciálegyenlet dimenziótlan alakja (lásd: Hegedűs et al. (2013)):

$$\dot{x}_1 = x_2, \quad (5.12)$$

$$\dot{x}_2 = \frac{N}{D}, \quad (5.13)$$

ahol:

$$N = \left(1 + \frac{R_{ref}}{t_{ref}} \frac{\dot{x}_2}{c_L}\right) \frac{t_{ref}^2}{R_{ref}^2} \frac{1}{\rho_L} - \frac{t_{ref}^2}{R_{ref}^3} \frac{1}{\rho_L} \frac{2\sigma + 4\mu_L x_2 (R_{ref}/t_{ref})}{x_1^2} - \left(1 - \frac{R_{ref} x_2}{3t_{ref} c_L}\right) \frac{3x_2^2}{2x_1} + \frac{t_{ref}^2}{R_{ref}^2} \frac{1}{\rho_L c_L} \left(\frac{p_{Gref}}{t_{ref}} \dot{x}_3 - p_\infty\right), \quad (5.14)$$

$$D = 1 - \frac{R_{ref}}{t_{ref}} \frac{x_2}{c_L} + \frac{4\nu_L}{c_L R_{ref} x_1}. \quad (5.15)$$

A (5.3) gáznyomásra felírt közönséges differenciálegyenlet dimenziótlan alakja:

$$\dot{x}_3 = \frac{t_{ref} \cdot T_{ref}}{p_{Gref} \cdot R_{ref}^2} \frac{3(\kappa - 1)\lambda_G}{x_1^2} \frac{\partial T_G}{\partial y} \Big|_{y=1} - 3\kappa \frac{x_3 x_2}{x_1}. \quad (5.16)$$

A koordináta transzformált energiaegyenlet a buborékon belül a dimenziótlan mennyiségekkel felírva:

$$\frac{\partial T_G}{\partial \tau} = C_1 \dot{x}_3 + \left(y \frac{x_2}{x_1} - u_G \frac{1}{x_1}\right) \frac{\partial T_G}{\partial y} + \frac{T_{ref} t_{ref}}{p_{Gref} R_{ref}^2} C_1 \frac{1}{x_1^2 y^2} \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_G y^2 \frac{\partial T_G}{\partial y}\right), \quad (5.17)$$

ahol:

$$C_1 = \frac{\kappa - 1}{\kappa} \frac{T_G}{x_3} \quad (5.18)$$

$$u_G = \frac{T_{ref} t_{ref}}{p_{Gref} R_{ref}^2} \frac{(\kappa - 1)\lambda_G}{\kappa \cdot x_3 x_1} \frac{\partial T_G}{\partial y} - \frac{y x_1 \dot{x}_3}{3\kappa \cdot x_3}. \quad (5.19)$$

Ugyanez a buborékon kívül, a folyadékterre:

$$\frac{\partial T_L}{\partial \tau} = \left(u_L z^2 \frac{1}{x_1} - z \frac{x_2}{x_1}\right) \frac{\partial T_L}{\partial z} + C_2 \frac{z^4}{x_1^2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_L \frac{\partial T_L}{\partial z}\right), \quad (5.20)$$

ahol:

$$C_2 = \frac{t_{ref}}{R_{ref}^2} \frac{1}{\rho_L c_L}, \quad (5.21)$$

$$u_L = x_2 z^2. \quad (5.22)$$

5.2.3. A PEREMFELTÉTELEK KEZELÉSE

A hőmérsékletmezőket diszkretizáljuk, azaz az osztáspontokkal vett értékeivel dolgozunk: $\underline{T}_G = [T_{G,0}, T_{G,1} \dots T_{G,NG}]$ és $\underline{T}_L = [T_{L,0}, T_{L,1} \dots T_{L,NL}]$. Annak érdekében, hogy a peremfeltételek könnyen kezelhetők legyenek az Extrema hálót (2.47) alkalmazzuk, de csak a $[0, 1]$ tartományba eső pontokkal dolgozunk. Fontos, hogy a pontokat úgy vegyük fel, hogy $y = 0$ és $z = 0$ pontba ne kapjunk osztáspontot. A páros és páratlan deriváló mátrixok a (2.108) és (2.113) alapján meghatározhatók.

Megjegyzendő, hogy az Extrema háló osztáspontjait kifejező összefüggés indexelési iránya: $y_0 = 1 \ y_{NG} \rightarrow 0$. A probléma áttekinthetőbbé válik és programozás technika szempontból könnyebb dolgunk lesz, ha az osztáspontok indexelését megcseréljük: $y_0 \rightarrow 0, \ y_{NG} = 1$. A z helykoordináta indexelést szintén cseréljük. Ennek megfelelően a deriváló mátrixok sorait és oszlopait is meg kell cserélnünk.

A koordináta transzformáció és a referenciajellemzők bevezetése után, a hővezetés peremfeltételei:

$$T_L(z = 0, t) = T_\infty / T_{ref}, \quad (5.23)$$

$$\frac{\partial T_G(y = 0, t)}{\partial y} = 0, \quad (5.24)$$

$$\lambda_G \frac{\partial T_G(y = 1, t)}{\partial y} = -\lambda_L \frac{\partial T_L(z = 1, t)}{\partial z}, \quad (5.25)$$

$$T_G(y = 1, t) = T_L(z = 1, t). \quad (5.26)$$

Mivel szimmetrikus hálókat alkalmazunk az első két peremfeltétel (5.23) és (5.24) automatikusan kielégül. A feladat a buborékfalán $y_{NG} = 1$ és $z_{NL} = 1$ pontokban az ismeretlen hőmérséklet meghatározása. Az (5.25) egyenletben szereplő deriváltakat a gáz és folyadék oldali szimmetrikus deriváló mátrixszal kifejezzük:

$$\lambda_G \left(\sum_{j=0}^{NG-1} D_{G,S}^{NG,j} \cdot T_{G,j} + D_{G,S}^{NG,NG} \cdot T_{G,NG} \right) = -\lambda_L \left(\sum_{j=0}^{NL-1} D_{L,S}^{NL,j} \cdot T_{L,j} + D_{L,S}^{NL,NL} \cdot T_{L,NL} \right), \quad (5.27)$$

ahol: $D_{G,S}^{NG,j}$ a gáz oldali, $D_{L,S}^{NL,j}$ a folyadék oldali szimmetrikus(páros) deriváló mátrix elemei. Az (5.26) alapján utolsó hálópontonban vett hőmérséklet értékek egyenlők:

$$T_{G,NG} = T_{L,NL}, \quad (5.28)$$

ezt kihasználva a hőmérséklet a buborékfalán az (5.27) egyenletből kifejezhető:

$$T_{G,NG} = T_{L,NL} = \frac{-STLN - STGN}{\lambda_G D_{G,S}^{NG,NG} + \lambda_L D_{L,S}^{NL,NL}}, \quad (5.29)$$

ahol:

$$STLN = \lambda_L \sum_{j=0}^{NL-1} D_{L,S}^{NL,j} \cdot T_{L,j}; \quad STGN = \lambda_G \sum_{j=0}^{NG-1} D_{G,S}^{NG,j} \cdot T_{G,j}. \quad (5.30)$$

Habár a négy peremfeltétel közül kettőben kihasználtuk a szimmetriát, érdemes megemlíteni, hogy a buborék falon alkalmazott eljárás egy teljesen általános és robusztus módszer a perem megoldására. Ezzel a technikával a legkülönbébb peremfeltételeket kezelhetők egyszerű függvények segítségével. A peremfeltétel módosításának nincs hatása magára a diszkretizációs folyamatra. Akár nemlineáris algebrai egyenletek is felírhatók, ekkor iterációval például Newton – Rapsón módszer az ismeretlen változók kiszámíthatók.

5.2.4. A KÖZÖNSÉGES DIFFERENCIÁLEGYENLET RENDSZER

Az (5.17) és (5.20) egyenletek diszkretizáljuk, majd a $\underline{T}_{G,t}$ és $\underline{T}_{L,t}$ utolsó elemét töröljük, mivel itt a peremfeltételből határozzuk meg a hiányzó hőmérsékletértéket (5.29) egyenlet felhasználásával. Így a belső pontokra NG és NL db elsőrendű közönséges differenciálegyenlet adódik. A gáz oldali hőmérsékletmezőre adódó közönséges differenciálegyenletek:

$$\dot{\underline{T}}_G = \underline{C}_1 \dot{x}_3 + \left(\underline{y}^* \frac{x_2}{x_1} - \underline{u}_G \right) \cdot \underline{D}_{G,S} \cdot \underline{T}_G + \frac{T_{ref} t_{ref}}{p_{Gref} R_{ref}^2} \frac{1}{x_1^2 y^{*2}} \underline{A} \cdot \underline{D}_{G,A} \left(\underline{\lambda}_G y^2 \underline{D}_{G,S} \cdot \underline{T}_G \right), \quad (5.31)$$

ahol:

$$\underline{C}_1 = \frac{\kappa - 1}{\kappa} \frac{\underline{T}_G}{x_3}; \quad \underline{u}_G = \frac{T_{ref} t_{ref}}{p_{Gref} R_{ref}^2} \frac{(\kappa - 1) \underline{\lambda}_G^*}{\kappa \cdot x_3 x_1} \underline{D}_{G,S} \cdot \underline{T}_G - \frac{x_1 \dot{x}_3}{3\kappa \cdot x_3} \underline{y}^*, \quad (5.32)$$

$\underline{D}_{G,S}$ és $\underline{D}_{G,A}$ a gáz oldali szimmetrikus és antiszimmetrikus deriváló mátrix, a $*$ pedig a vektor/mátrix utolsó elemének/sorának törlését jelöli. Az előzőhöz hasonlóan folyadék oldali hőmérsékletmezőre:

$$\dot{\underline{T}}_L = \left(\underline{u}_L z^{*2} \frac{1}{x_1} - z^* \frac{x_2}{x_1} \right) \cdot \underline{D}_{L,S}^* \cdot \underline{T}_L + C_2 \frac{1}{x_1^2} z^{*4} \cdot \underline{D}_{L,A}^* \left(\underline{\lambda}_L \underline{D}_L \cdot \underline{T}_L \right), \quad (5.33)$$

ahol:

$$\underline{B} = \frac{t_{ref}}{R_{ref}^2} \frac{1}{\rho_L c_{pL}}; \quad \underline{u}_L = x_2 z^{*2}, \quad (5.34)$$

$\underline{D}_{L,S}$ és $\underline{D}_{L,A}$ a folyadék oldali szimmetrikus és antiszimmetrikus deriváló mátrix. A $*$ továbbra is sor/elem törlését jelöli. Az (5.31) és (5.33) egyenletekben ügyelni kell a deriváló mátrixok sorrendjére, mivel páros (szimmetrikus) függvényt deriválva, páratlan (antiszimmetrikus) függvényt kapunk. A páros és páratlan függvények deriválására pedig eltérő deriváló mátrixot kell alkalmazni (lásd: 2.4.1. fejezet).

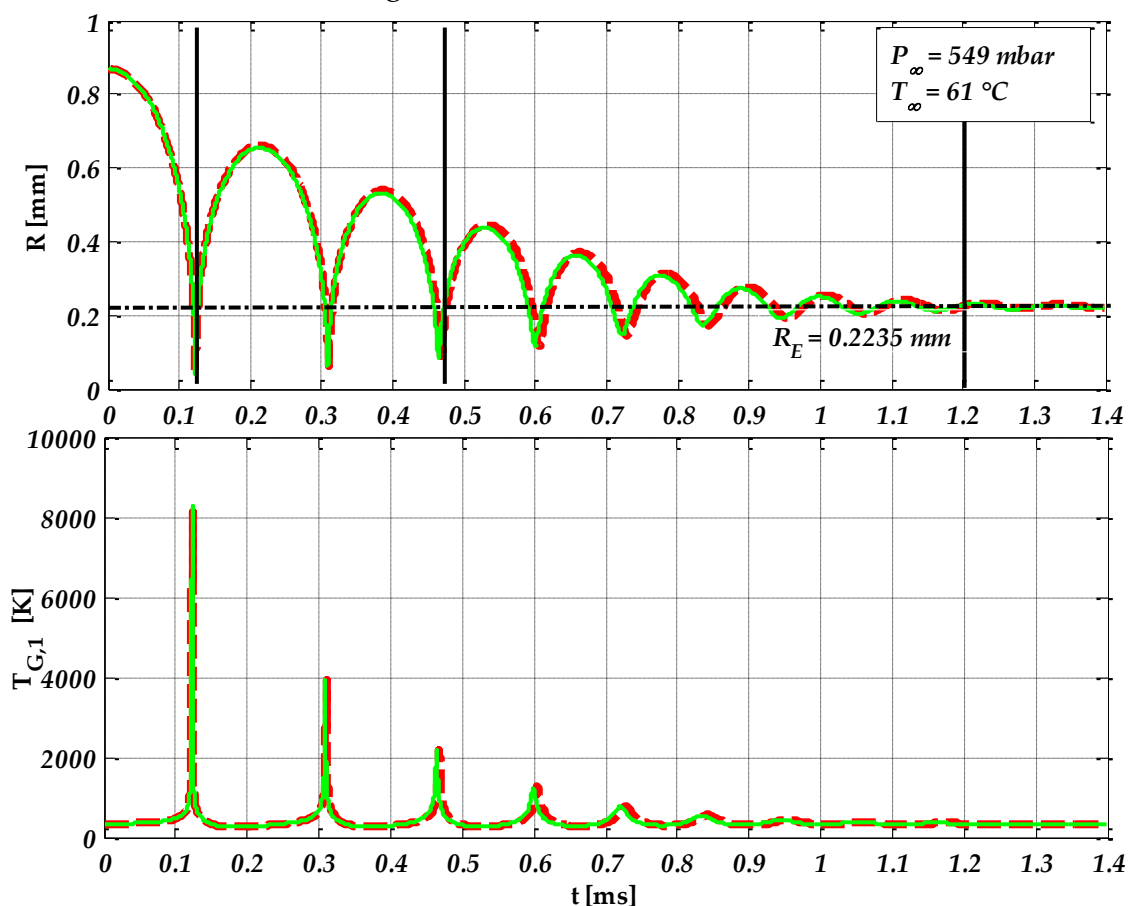
A buborék lengését leíró (5.12), (5.13) két elsőrendű differenciálegyenlet, a gáznyomásra kapott (5.16), valamint a hőmérséklet mezők felbontásából a belső pontokra adódó közönséges differenciálegyenleteket vektorba rendezzük:

$$\underline{X}^T = [\dot{x}_1 \quad \dot{x}_2 \quad \dot{x}_3 \quad \dot{T}_{G,0} \quad \cdots \quad \dot{T}_{G,NG-1} \quad \dot{T}_{L,0} \quad \cdots \quad \dot{T}_{L,NL-1}]. \quad (5.35)$$

Ez már egy közönséges differenciálegyenlet megoldó algoritmussal megoldható. Mivel a $\dot{T}_G$ és $\dot{T}_L$ kiszámításához szükség van a teljes hőmérsékletmezőre, miután a belső pontokkal léptünk a következő időszintre, a peremfeltétel behelyettesítésével a teljes T_G és T_L hőmérsékletmezőt előállítjuk az új időszinten.

5.3. A megoldási módszerek összehasonlítása

A numerikus szimuláció eredménye az 5.2. ábrán látható. A hőmérséklet mező meghatározására a piros görbék esetén másodrendű centrális differencia sémát, zöld görbe esetén pedig szimmetrikus spektrál kollokációs módszert alkalmaztunk. Minden esetben 50 elemű hálón végeztük a számításokat.

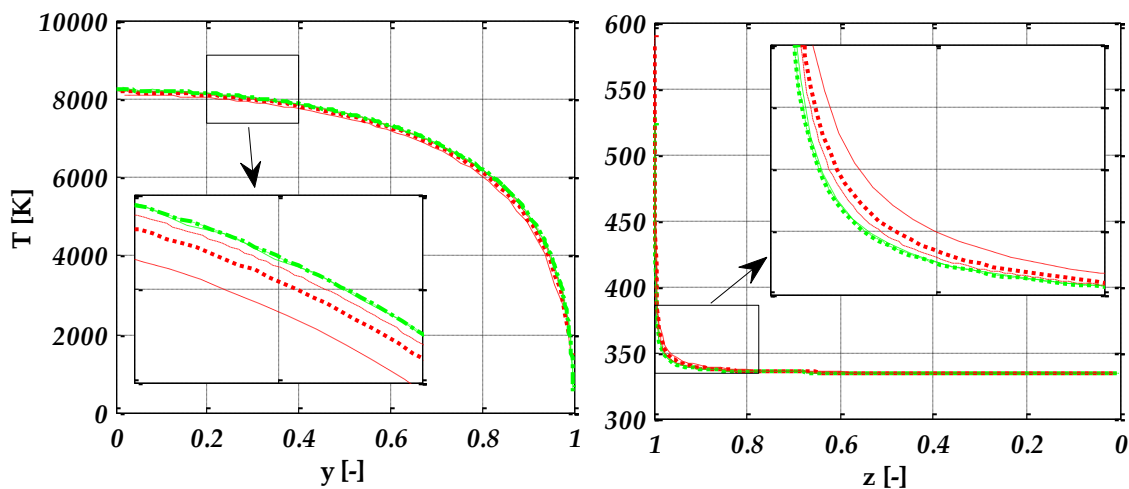


5.2. ábra: A másodrendű differencia sémával (piros) és a spektrál kollokációs módszerrel (zöld) kapott eredmények összehasonlítása. A felső diagramon a buboréksugár – idő görbe látható. Az alsó diagramon a buborék középpontjához legközelebb eső pontban ábrázoltuk a hőmérséklet változását az idő függvényében

A szimuláció paramétereinek olyan értékeket választottunk Hegedűs et al. (2013) mérési eredményei alapján, ahol a buborék lengése során összeroppan: $p_\infty = 549 \text{ mbar}$ nyomás és $T_\infty = 61^\circ \text{C}$ hőmérséklet. A számítást a buboréksugár maximumából $R_{\max} = 0,87 \text{ mm}$ indítottuk. Az összeroppanás során a buborék sugara na-

gyon rövid idő alatt jelentősen csökken, ami extrém magas nyomásokat és hőmérsékletet eredményez. Az alsó diagramon a buborék középpontjához közel (háló első eleme, a nulladik maga a középpont lenne, de az a peremfeltételből számolódik) ábrázoltuk a hőmérséklet változását az időben. Az összeroppanás pillanatában a hőmérséklet meghaladja a 8000 K hőmérsékletet. A buborék lengése fokozatosan csillapodik, majd beáll az egyensúlyi helyzetbe.

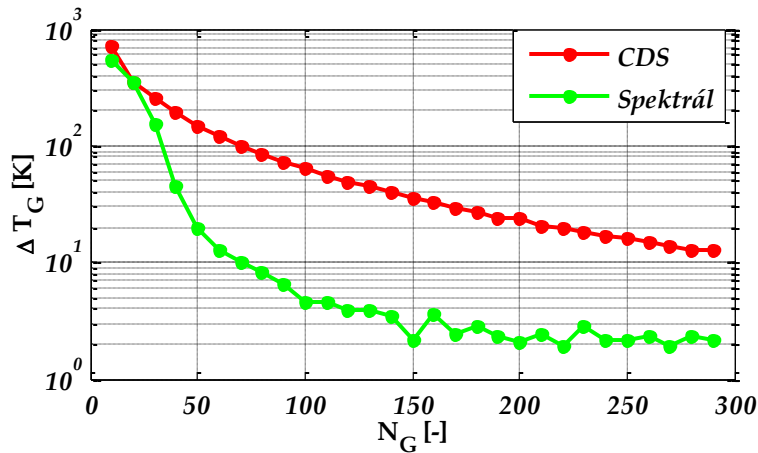
Három különböző időpillanatban mutatjuk be a gáztér és a folyadéktér hőmérséklet mezejét. Az első időpillanat 0.1228 ms , az első összeroppanás pillanata, itt tapasztaltuk a legmagasabb hőmérsékleteket. A második időpont 0.47 ms , a hőmérséklet meredeken csökken, és a buboréksugár rohamosan nő ebben a pontban. A harmadik 1.2 ms , itt már a lengések jelentősen csillapodtak, közel vagyunk az egyensúlyi buboréksugárhoz. A vizsgált időpontokat az 5.2. ábrán függőleges vonalakkal jelöltük.



5.3. ábra: A hőmérsékletmező alakulása a buborék belsejében (bal) és a folyadékban (jobb), 0.1228 ms időpillanatban. A zöld a spektrál módszerrel történő számítások eredménye, a piros a másodrendű centrális differencia séma alkalmazásával meghatározott hőmérsékletmező. A szaggatott vonal 50, a pontozott 100, a pont-vonal 200 elemű hálón kapott számítás eredmény. A

Az 5.3. ábrán a buborék belsejében és a buboréktól távol a folyadékban lévő hőmérsékletmező alakulását láthatjuk. A zöld a spektrál, a piros a differencia sémával kapott megoldás. A számítások 50 (szaggatott), 100 (pontozott) és 200 (pontvonal) elemű hálón történt. Az ábra alapján láthatjuk, hogy a folyadéktérben a hőmérséklet fokozatosan lecseng. A differencia séma és a spektrál sémás megoldó a távolban jól illeszkedik. A hőmérséklet a buborék falhoz közel, rohamosan növekszik. A nagyított ábrán jól megfigyelhető, hogyan alakul a hőmérséklet mező a felbontás növelésével a különböző sémák esetén. A zöld görbék jó közelítéssel megegyeznek. A másodrendű centrális differencia séma alkalmazásával kapott eredmények, az elemszám növelésével egyre jobban megközelítik a spektrál módszerrel kapott zöld görbéket. Az ábra bal oldalán a buborék belsejében lévő hőmérséklet mezőt látjuk. A spektrál módszerrel kapott eredmények a különböző elemű hálókön jól egyeznek, míg a másodrendű differencia sémával kapott megoldások az elemszám növelésével fokozatosan konvergálnak a zöld görbék felé.

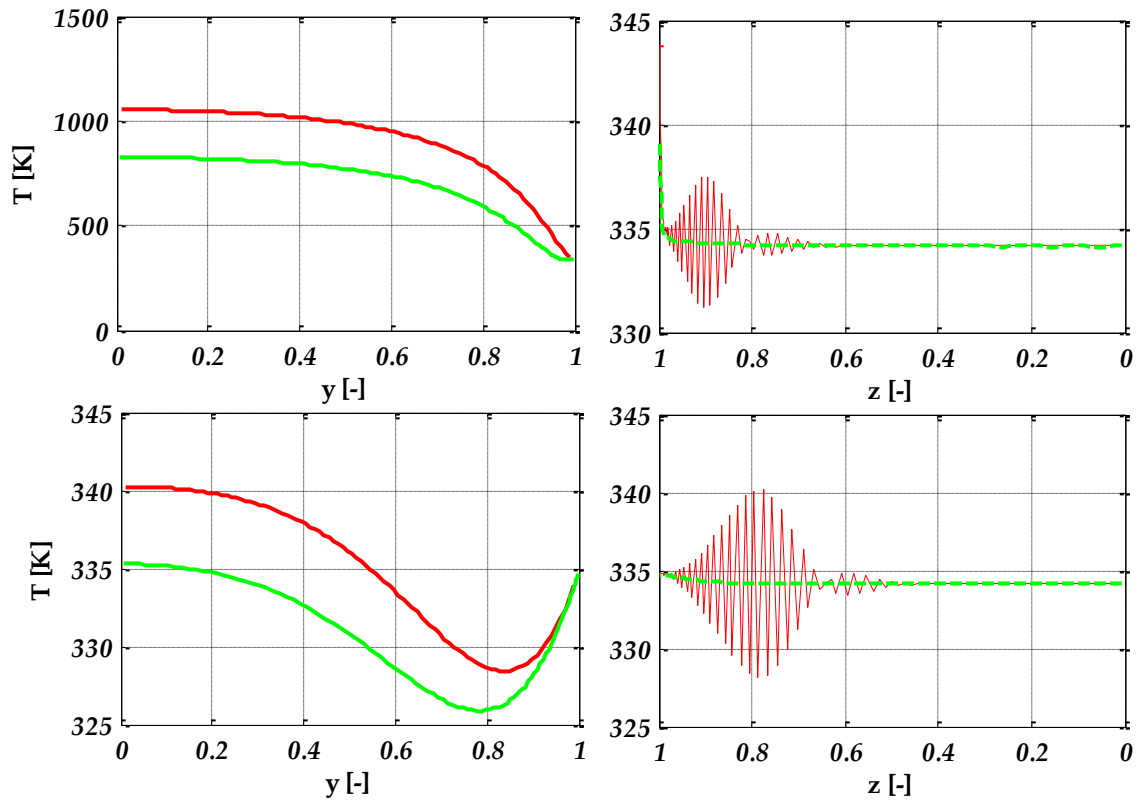
A megoldási módszerek konvergenciáját az 5.4. ábra szemlélteti, a buborék belsejében. A háló elemszámát 10-esével fokozatosan növeljük, és két egymást követő elemszámú hálón kapott eredmény különbségének abszolút maximumát ábrázoltuk az elemszám (szabadsági fog függvényében). Például az $N_G = 50$ elemszámhoz leolvasott $\Delta T_G \cong 20K$, az jelenti, hogy a 60 és 50 elemű hálón végzett számítások eredménye közötti eltérés maximuma $20K$.



5.4. ábra: Egymást követő növekvő elemszámú hálókön végzett szimulációk eredményeként kapott gáztéri hőmérsékletmezők különbségének abszolút maximum, az összeroppanás pillanatában.

Az ábra alapján látható, hogy a spektrál módszerrel kapott görbe kezdetben meredekebben változik, gyorsabban konvergál, mint a differencia séma. $N_G = 200$ felett, már $1-2K$ nagyságrendű a különböző elemű spektrál hálókön kapott megoldások közötti eltérés abszolút maximuma. Itt már megközelítjük a spektrál módszerrel elérhető maximális pontosságot.

Az utolsó két vizsgált időpillanatban az 5.5. ábrán láthatók a kapott hőmérséklet mezők, 100-100 elemű hálón. Míg az összeroppanás pillanatában a különböző numerikus módszerekkel kapott megoldások közötti eltérés kicsi volt (lásd: 5.3. ábra), addig a távolabbi időpontokban ez az eltérés fokozódik. A buborék belsejére kapott hőmérséklet mezők (ábra bal oldali diagramjai) jellegre ugyan hasonlítanak, viszont a távolterben a differencia sémával kapott megoldás (piros) oszcillálni kezd. Spektrál módszer alkalmazásával ezt a jelenséget nem tapasztaljuk..



5.5. ábra: A hőmérséklet mezők alakulása a $t=0.47$ ms (felül) és $t=1.2$ ms (alul) időpontban. A bal oldali diagramok a buborékon belül, a jobb oldali diagramok a folyadékban számított hőmérsékletmezőket ábrázolja. A másodrendű centrális differencia sémával kapott eredmény piros, a spektrál kollokációs módszerrel kapott pedig zöld színnel van jelölve. A számítás során használt háló minden esetben 100 elemből állt.

5.4. Tovább lépési lehetőség

A fejezetben elsősorban a spektrál módszer alkalmazhatóságát és előnyeit mutatuk be a szabadlengést végző buborék példáján keresztül. A modell azonban nem csak „iskolapélda” szerepét tölti, mint a korábbi hővezetési- vagy a hullámegyenlet. A nyomás peremfeltételre konstans érték helyett, harmonikus gerjesztést megadva, a modell alkalmassá válik a gázbuborék nemlineáris dinamikai vizsgálatára.

Számos olyan alkalmazási terület létezik, például ultrahangos technológiában, ahol a buborék összeroppanása során keletkező extrém körülményeket hasznosítják. Azért, hogy a technológia hatékonysága megfelelő legyen, olyan paramétertartományban kell üzemeltetni, ahol a buborék ultrahangos gerjesztés hatására összeroppan. Ezen paramétertartományok numerikus feltérképezéséhez nyújthat segítséget az itt bemutatott modell.

6. ÖSSZEFOGLALÁS

A dolgozatban a parciális differenciálegyenletek egy kevésbé ismert numerikus megoldási módszerével a spektrál módszerrel foglalkoztunk. Az irodalomkutatás során számos különböző alkalmazási példával találkoztunk, ahol sikerrel alkalmazták a spektrál és pszeudo-spektrál módszereket. Az áramlástechnika alkalmazásokon és az egyszerű példa kapcsán is láthatjuk, milyen előnyei vannak az elterjedten használt differenciasémákkal szemben: nagyobb konvergencia sebesség, kisebb fáziskésés, szimmetriák kihasználásának lehetősége. A dolgozatban nem valós műszaki probléma megoldása volt a célunk, hanem egyszerű alkalmazási példákon keresztül ismertük meg a spektrál módszereket, és mutattuk be annak jellegzetességeit.

Habár a spektrál módszer meglehetősen kiforrott numerikus eljárás és számos szakirodalom áll rendelkezésre, a módszer matematikai háttere nehezen érthető, az egyes levezetések nehezen vagy egyáltalán nem találhatók meg, ezért kezdetben sok utánajárást igényel. A dolgozat második fejezetében részletesen összefoglaltuk a módszer matematikáját, és bemutattuk a nehezen érthető levezetések.

A spektrál módszerek két csoportba oszthatók: nem interpolációs és interpolációs módszerek. Történelmileg a nem interpolációs módszert fedezték fel először, ezért klasszikus spektrál módszernek is nevezik. Az ismeretlen függvényt a számítási tartományon globálisan illesztett polinomok vagy harmonikus függvények (bázisfüggvények) lineáris kombinációjával közelítjük. A cél az ismeretlen függvény minél pontosabb közelítése, azaz a reziduum (pontos és közelítő megoldás különbsége) minimalizálása. A különböző klasszikus spektrál módszerek a minimalizálás módszerében különböznek. A minimalizálás egy alkalmasan megválasztott próbafüggvény segítségével történik, melyre ortogonális projekciót végzünk. A dolgozatban a Galerkin féle klasszikus spektrál módszert ismertettük, ekkor a próbafüggvény megegyezett a bázisfüggvénnyel. A bázisfüggvények együtthatóira egy mátrixegyenletet vezettünk le:

$$\underline{a} = \underline{\Phi}_F^{-1} \cdot \underline{f}_F, \quad (6.1)$$

ahol $\underline{a}^T = [a_0, a_1, \dots, a_N]$ együtthatókat tartalmazó vektor, $\underline{\Phi}_F = \langle \phi_n(x), \phi_m(x) \rangle$ együttható mátrix, és $\underline{f}_F = \langle f(x), \phi_n(x) \rangle$ belső szorzatokból képzett vektor, $n, m = 0, 1, \dots, N$. Egy $\rho(x)$ súlyfüggvényt bevezetve biztosítható, hogy a bázisok ortogonális rendszert alkossanak, ekkor csak az együttható mátrix főátlójában nem nullák az elemek. Ezzel az együtthatók a teljes mátrix kiszámítása nélkül meghatározhatók:

$$a_n = \frac{\langle f(x), \phi_n(x) \rangle}{\langle \phi_n(x), \phi_n(x) \rangle} \quad n = 0, 1, \dots, N. \quad (6.2)$$

Interpolációs módszer esetén a számítási tartományt felbontjuk osztáspontokra (spektrál módszer esetén kollokációs pontoknak is nevezik) és a pontokra illesztett polinom segítségével közelítjük az ismeretlen függvényt. Bizonyítható, hogy az in-

terpolációs módszer megegyezik a Galerkin módszerrel, ha az együtthatókra kapott mátrixegyenletben szereplő folytonos integrálokat numerikusan közelítjük.

Fontos kérdés, hogy milyen bázisfüggvényt alkalmazzunk, és hogyan válasszuk meg az kollokációs pontokat, ugyanis az egyenközü eloszlás esetén a háló sűrítés nem minden esetben eredményez pontosabb megoldást. A bázisfüggvényt a számítási tartomány határozza, ha a tartomány periodikus a Fourier bázisok alkalmazása adja a legjobb eredményt. Nem periodikus peremfeltételek esetén az esetek 95%-ban a Chebyshev polinomokat ajánlott választani (Boyd (2001)).

Az integrálok numerikus közelítésére Gauss kvadraturákat alkalmazva meghatározható minden bázisfüggvény rendszer esetére két optimális háló. Mindkét bázisfüggvény rendszer esetére két optimális hálót (Roots és Extrama grid) mutattunk be. Levezettük a háló pontjaira illeszthető Lagrange féle karakterisztikus bázisfüggvény meghatározására szolgáló képletet, és a numerikus integráláshoz szükséges kvadratura súlyokat.

Chebyshev bázis esetén a Roots háló pontosan közelíti a folytonos integrállal meghatározott együttható mátrixot, az integrál numerikus közelítése legalább $2N$ fokú polinomra pontos. Extrama háló esetén az utolsó elemben eltérés van ez picivel pontatlanabb, csak $2N - 1$ fokú polinomra pontos, viszont a háló nulláodik és utolsó pontja a számítási tartomány két szélső pontja így a peremfeltétel egyszerűen kezelhető lesz parciális differenciálegyenlet megoldása során.

Fourier bázis esetén több dologra kell figyelniünk. A számítási tartomány a $[0, 2\pi]$ intervallum így 2π szerint periodikus Lagrange féle karakterisztikus bázisfüggvényeket kell kapnunk. Ez akkor teljesül, ha páros számú osztáspontot veszünk fel. A Fourier bázisok szinuszos és koszinuszos tagjait kétféle indexeléssel is felírhatjuk. Roots háló esetén a kollokációs pontok a $\cos(N/2 \cdot x)$ függvény zérus helyei. Mivel N csak páros szám lehet, ha az első felírási módot (2.55) választjuk az együttható mátrix átlójának utolsó elemében is $\cos(N/2 \cdot x)$ szerepel így szinguláris mátrixot kapunk. Azért, hogy a szingularitást elkerüljük a második felírási módot (2.56) kell választanunk, ekkor az utolsó elemben $\sin(N/2 \cdot x)$ szerepel így az együttható mátrix nem szinguláris. Extrama háló esetén fordított a helyzet, a kollokációs pontok $\sin(N/2 \cdot x)$ zérus helyei ezért az első felírási módot kell választanunk. Fourier bázis esetén az integrál numerikus közelítése $2N - 1$ fokra pontos.

A Roots az Extrama háléhoz képest π -vel, azaz fél periódussal van eltolva. Ezen ötlet alapján megvizsgáltuk az $1/4$ és $3/4$ periódussal eltolt hálót is. Az eltolt hálón kapott együttható mátrix a Fourier bázisok mindkét felírása mód esetén pontosan egyezett a Galerkin módszer együttható mátrixával. Az eltolt hálón kapott mátrix egyik esetben sem lesz szinguláris és az integrál közelítés legalább $2N$ fokra pontos. Ezzel a hálóeltolással irodalomban még nem találkoztunk.

Az ismeretlen függvény hely szerinti deriváltjait a közelítő függvényt sor deriválásával közelítésével, levezethető egy $\underline{\underline{D}}$ deriváló mátrix,

mely segítségével meghatározható az $f(x)$ függvény hely szerinti deriváltjának értékei a kollokációs pontokban:

$$\underline{f}_x = \underline{D} \cdot \underline{f}. \quad (6.3)$$

A deriváló mátrix elemeire egyszerű összefüggések vezethetők le közvetlenül a Lagrange féle karakterisztikus bázisfüggvényekből is.

A spektrál módszer megengedi a szimmetriák kihasználását is, ekkor felezni, Fourier bázisok esetén akár negyedelni is lehet a szükséges pontokat. Az eredeti deriváló mátrix elemeiből könnyen meghatározható a szimmetriát figyelembe vevő mátrixok. Szimmetriák kihasználására két különböző mátrix szükséges: az egyik a páros függvény deriválására, a másik a páratlan függvény deriválására alkalmas kell, hogy legyen, mivel a függvény paritása változik deriválásnál.

Spektrál módszerrel három különböző alkalmazási példát mutattunk be. Az első a hővezetési egyenlet volt, mivel nagy pontosságú analitikus megoldás határozható meg. Az analitikus megoldáshoz viszonyítva a különböző szabadsági fok mellett kapott numerikus számítás eredményét a konvergencia sebességek vizsgálhatók. Mind periodikus és nem periodikus peremfeltétel esetén azt tapasztaltuk, hogy a spektrál módszer konvergencia sebessége lényegesen nagyobb, mint az ugyanannyi szabadsági fokkal rendelkező másodrendű differencia sémáé. Az időlépés toleranciáját (10^{-12} nagyságrend) a spektrál módszer már 10 szabadsági fok környezetében eléri. Míg a differencia séma hibája ekkor csak 10^{-2} nagyságrendű. A szabadsági fok további növelésével a spektrál módszer hibája nem csökken az időlépés toleranciája alá. A konvergencia diagramok alapján megfigyelhető, hogy az N szabadsági fok esetén Galerkin módszerrel elért pontosság kollokációval durván $N+2$ szabadságfokkal érhető csak el. Ebből látható, hogy probléma megoldása során ahol nincs lehetőség nagy felbontás alkalmazására a Galerkin módszer ezen előnye lényeges lehet. Nagy felbontás esetén a kollokációs módszert célszerű alkalmazni, mert lényegesen gyorsabb, hiszen nincs szükség integrálásra.

A következő alkalmazási példa a hullámegyenlet volt. A konvergencia sebességekben hasonló dolgot tapasztaltunk, mint a hővezetési egyenlet során. A példa kapcsán vizsgált tulajdonság a numerikus megoldók fázistartó képessége volt. A spektrál módszer itt is jobbnak bizonyult, még a késői időpillanatokban is jól illeszkednek az analitikus megoldásra, míg a másodrendű differencia sémával kapott megoldás fokozatosan késik, és torzul. A jelenség periodikus és nem periodikus peremfeltétel esetén is megfigyelhető.

Az utolsó alkalmazási példa egy összetett buborékmodell. A buboréklengést leíró közönséges differenciálegyenlethez csatoltuk az energiaegyenletet, ezzel a buborék belsejében és a buboréktól távol is meghatározhatóvá vált a hőmérsékletmező. A példa kapcsán láthattuk, hogyan használhatók ki a modell szimmetria tulajdonságai spektrál módszer alkalmazásával. Koordináta transzformáció után a végtelen kezelése is szimmetrikus hálóval történt. Mivel a szimmetrikus Chebyshev Extrema hálót

használtuk, az utolsó pont, a számítási tartomány széle, vagyis a buborékfal. Az Extrema hálón a peremfeltétel egyszerűen kezelhető: a szélső pontban a változó értéke lehet konstans, vagy megadható függvény segítségével, mely tartalmazhat akár iterációt igénylő nemlineáris algebrai egyenleteket is. A legegyszerűsebb peremek is kezelhetők, ezen felül a peremfeltétel módosításának nincs hatása magára a diszkretizációs folyamatra, ezzel egy nagyon robusztus peremfeltétel kezelési módszert kapunk.

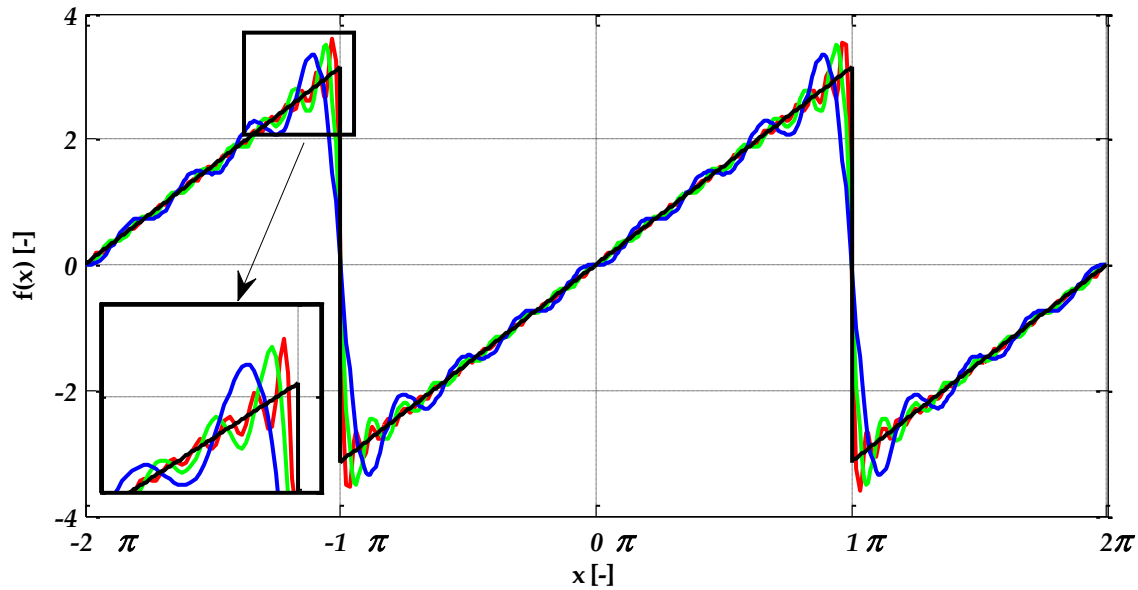
Az első fejezetben feltett kérdések közül az első háromra már mi magunk is tudunk válaszolni. A hosszas levezetések után egy hasonló deriváló mátrixhoz jutunk, mint differenciasémák alkalmazása esetén. A differenciaséma és a pszeudo-spektrál megoldó kódok között csak a pontok eloszlását kell módosítani és a deriváló mátrixot cserélni, minden más teljesen analóg. A nagy pontosság miatt a hosszú távú számítások is stabilak erre példa a hullámegyenlet. A valós mérnöki életben nincs mindig szükség ekkora nagy pontosságra, viszont egy elvárt pontosság már lényegesen kevesebb szabadsági fokkal elérhető, mint differencia sémával, ezzel csökkenthető a számítási kapacitás igény.

Az utolsó kérdésre a dolgozatból nem kapunk választ. Szakadásos problémákra (pl: hullámfront terjedés) léteznek eljárások, mellyel ezek is megoldhatók, azonban ez további elméleti megfontolást igényel.

7. KITEKINTÉS

A dolgozatban nem vizsgáltunk olyan eseteket, amikor a közelített függvényen szakadás (pl.: dirac delta, négyszög-, fűrészfogfüggvény) van. Egy szakadásos függvény harmonikus függvényekkel történő közelítése során a közelítő függvény a diszkontinuitás környezetében erősen oszcillálni kezd, amit Gibbs jelenségnek nevezünk. Az oszcilláció a közelítés foksámának növelésével egyre erősebben jelentkezik, erre látunk példát a 7.1. ábrán, ahol egy fűrészfog függvény közelítése látható 8 (kék), 16 (zöld), és 32 (piros) N esetén. Az oszcilláció miatt romlik a közelítés pontossága. Ha a térbeli közelítés rossz, a spektrál módszer nem használható nagy pontosság elérésére és hibás megoldást kapunk. Ezt az oszcilláció miatti hibát csökkenteni kell, erre léteznek simító eljárások, másképpen szűrők.

Mivel az oszcillációt a Fourier együtthatók lassú csökkenése okozza (lásd: Canuto et al. (2006)), olyan simítás szükséges, amely a magasabb rendű együtthatók értékét csökkenti. Így az oszcillációt okozó nagyobb modulusú trigonometrikus tagok csillapodnak. Másrészt, az együtthatók belső struktúrája hordozza az információt a szakadásról, amit nem szabad elveszíteni. A túl erős szűrés túlságosan elsimítja a közelítő függvényt, ami megint csak pontatlan reprezentációja a valódi függvénynek. Ezért a simító módszert alkalmasan kell megválasztani.



7.1. ábra: Gibbs jelenség, fűrészfog függvény Fourier sora, kék N=8, zöld N=16, piros N=32 tag esetén, fekete a közelített függvény.

A simításra egy kézenfekvő megoldás, hogy a Fourier sor együtthatóit c_n megszorozzuk egy σ_n szorzótényezővel. A szűrt Fourier sor komplex alakban írva:

$$f(x) \cong P_{N,\sigma}(x) = \sum_{n=-N/2}^{N/2} \sigma_n \cdot c_n \cdot e^{inx}, \quad (7.1)$$

ahol a Fourier sor együtthatója:

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cdot e^{-inx} dx. \quad (7.2)$$

A σ_n szorzótényező valós nem negatív szám, és rendelkezik a következő tulajdonságokkal: $\sigma_0 = 1$, $\sigma_n = \sigma_{-n}$ és $|n|$ csökkenő függvénye. A Fourier sor simításának klaszikus módja a Cesáro szumma. A szorzótényező ekkor:

$$\sigma_n = 1 - \frac{|n|}{N/2 + 1}, \quad (7.3)$$

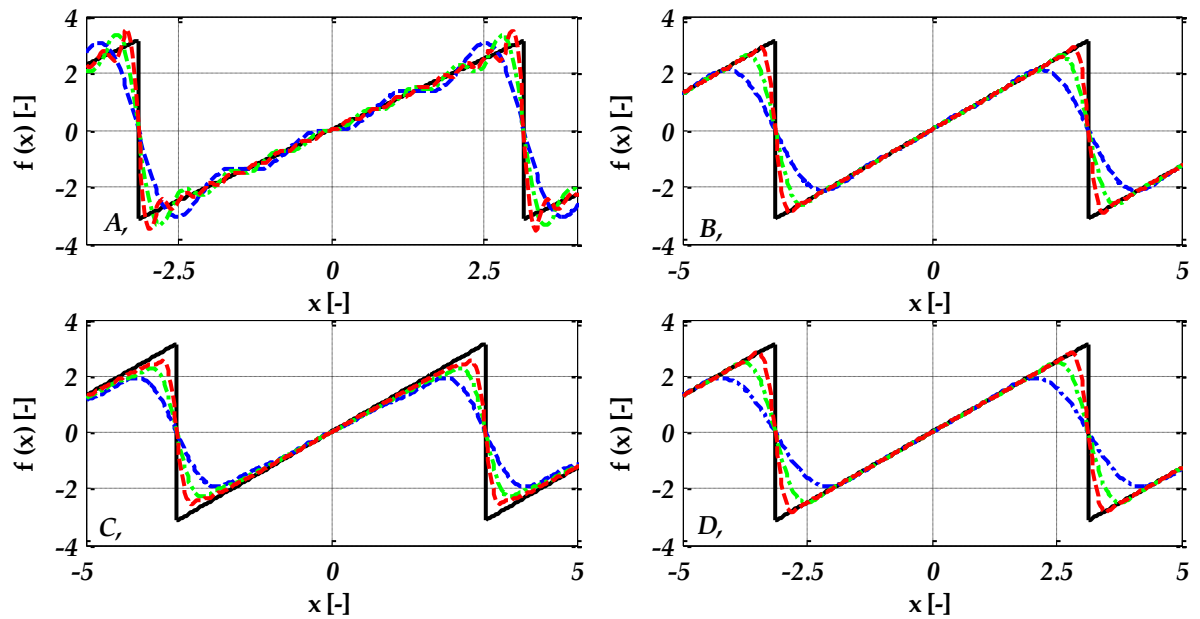
amely $|n|$ növelésével lineárisan csökken. Egy másik egyszerű szűrő a Lanczos módszer:

$$\sigma_n = \frac{\sin(2n\pi/N)}{2n\pi/N}. \quad (7.4)$$

A harmadik egyszerű módszer az emelt koszinuszos („raised cosine”) szűrő:

$$\sigma_n = \frac{1 + \cos(2n\pi/N)}{2}. \quad (7.5)$$

Az említett három szűrő a legegyszerűbbek közé tartozik, az általuk kapott szűrt Fourier sort a 7.2. ábra illusztrálja.



7.2. ábra: Szűrési eljárások bemutatás $N=8$ (kék), $N=16$ (zöld), $N=32$ (piros) esetén. Az A.) diagram a szűrés nélküli, B.) Cesáro, C.) Lanczos, D.) emelt koszinuszos szűrő alkalmazásával kapott Fourier sor.

A bemutatott szűrési eljárásoknál bonyolultabbak is léteznek például exponenciális, vagy Vandeven. Canuto et al. (2006) részletesen tárgyalja az alkalmazható szűrőket. Mivel a Chebyshev polinomok változó cserével egy koszinuszos függvéynsorra alakíthatók, simító eljárások hasonlóképpen alkalmazhatók rajtuk. A simító eljárásokat a spektrál megoldóban az együtthatón alkalmazva jól modellezhetővé válnak a lökéshullám problémák is.

Egy másik továbblépési lehetőség a spektrál és fizikai tér közötti transzformáció hatékonyságának növelése. Az együtthatók meghatározása a mátrix szorzat transzformációt (MMT) mutattuk be. Egy oszlopvektort, mely az osztáspontonban vett függvényértéket tartalmazza, szorzunk egy négyzetmátrixszal. A műveleti igény $\sim 8N^2$ arányos. Fourier, és Chebyshev bázisok esetén a spektrál együtthatók FFT („Fast Fourier Transzform”) is meghatározhatók melynek műveleti igénye $\sim 5N \log_2 N$, ahol N 2 hatványa. A Chebyshev polinom bázis változócserevel koszinuszos Fourier sorra alakítható. Látható, hogy nagy N esetén a számítási igény FFT alkalmazásával lényegesen kevesebb, mint MMT alkalmazásával. Az FFT másik előnye, hogy szinte minden programnyelvbe beépített függvény, így nincs szükség FFT kód írására. A transzformált térben elvégezve a deriválást egy inverz Fourier transzformációval a fizikai térbeli derivált is előállítható az osztáspontokban.

Habár a spektrál térben történő deriválásra nincs minden esetben szükség, mivel a deriváló mátrixszal közvetlen a fizikai térbeli deriváltat kapjuk meg. A korábban említett szűrőket a spektrál térben az együtthatókon tudjuk alkalmazni. Ehhez célszerű a gyorsabb FFT használni. A szűrők és az FFT együttes alkalmazásával megoldhatóvá válnak olyan problémák, mint például nyílt felszínű csatornaáramlások, vagy nyomáshullám terjedése csövekben. Ezzel az eljárással az elterjedten alkalmazott ka-

rakterisztikák módszerénél gyorsabb, pontosabb és robosztusabb megoldási módszert kaphatunk.

Az eddigi problémák mindegyike egy térdimenzióra vonatkozott, azonban az irodalmi áttekintő során láthattuk, hogy a spektrál módszer több dimenzióban is hatásos eszköz, áramlástan szimulációk megoldására. A későbbiekben cél lehet a magasabb dimenziók irányába előre lépni.

8. SUMMARY

The spectral and pseudospectral method is a family of methods for solving differential and integral equations. The basic idea is to assume that the known $f(x)$ function can be approximated by a sum of $N + 1$ basis functions $\phi_n(x)$. The difference between the exact and the approximating function called residual $R(x, a_n)$. Our goal is to choose the series coefficients a_n so that the residual function is minimized. The different spectral and pseudospectral methods differ mainly in their minimization strategies.

In present paper we concentrate on to introduce the capabilities of spectral methods, not for solving real engineering problems. We summarize the mathematical principles and demonstrate the advantages and disadvantages of the method by solving simple partial differential equations.

There are two main kingdoms of spectral methods: interpolating and non-interpolating methods. The non-interpolating methods also called classic spectral method. The known $f(x)$ function approximated by global basis functions. One can compute the coefficients of the approximating series, with the idea of orthogonal projection, by multiplying $f(x)$ by suitable trial functions $w_n(x)$ and integrate. If the $\phi_n(x)$ basic functions already satisfy the boundary conditions, the trial and basic functions can be equal $\phi_n(x) = w_n(x)$. This method is one of the early spectral methods, named as Galerkin spectral method (see: Galerkin (1915)).

The interpolating or pseudospectral methods approximate the know $f(x)$ function by an expression $P_N(x)$ fitted on the interpolation (or named as collocation in spectral terminology) points. The truncated series agree with $f(x)$ at each collocation points $f(x_i) \equiv P_N(x_i)$. Thus the residuals at the gridpoints are zeros; hence the coefficients can be obtained. The pseudospectral family of algorithms is closely related to the Galerkin method. To show this and to understand the mechanics of pseudospectral methods, we reviewed some classical numerical analysis: polynomial interpolation, trigonometric interpolation, and Gaussian integration.

An important question is „What set of basic functions $\phi_n(x)$ will work?“. We found that the geometry determine the basis set. If the solution is spatially periodic the best result can be obtained by the simple Fourier series. To solve non-periodic problems the best choice for 95% of all application is Chebyshev polynomials (see Boyd (2001)). There are exceptions, if the domain is infinite or semi-infinite, one can use Rational Chebyshev, Hermit Laguerre polynomial or Sinc functions as basis set. We focused on the two general basis sets, Fourier series and Chebyshev polynomials.

The other important question is „What distribution of collocation points gives the best accuracy?“ We answered the questions with the usage of Gaussian quadrature forms to evaluate the integral values in Galerkin method. We observed that, there are two optimal mesh, named Roots and Extrema grid for the general basis sets.

Please note that only even number of grid point can be used with Fourier basis set. One has to pay attention on the indexing of Fourier terms. If use Fourier Extrema grid and even index for cosine, odd index for sine terms, the collocation points are the zeros of $\sin(N/2x)$ and the last Fourier term is $\sin(N/2x)$, which cause singularity in the matrix equation. Therefore the index must be reversed. The situation is similar with Fourier Roots grid and odd index for cosine and even index for Fourier sine terms. The collocation points are the zeros of $\cos(N/2x)$ and the last Fourier term is $\cos(N/2x)$ as well. As a curiosity, if we use shifted grids, with $1/4$ or $3/4$ periods offset from Extrema grid, the singularity can be avoided. We can't find any references about these shifted Fourier grids.

As a result of mathematical procedures we derive differential matrices for each optimal spectral grid. The elements of these matrices depend on only the gridpoints. The aid of the differential matrix, the spatial derivate of a known function at the interpolant points can be calculated by a simple matrix-vector multiplication. This algorithm can be implementing in time dependent boundary value problems. We use this method for solving the one dimensional heat equation and wave equation.

The spectral methods permit unique exploitation of the symmetries. We demonstrate, how to modify the spectral mesh to exploit parity, and utilize it for solving the energy equation coupled to the Keller – Miksis bubble model.

As consequence, we experience that, the spectral method gives high accurate solution, extremely fast convergence speed, and it has minimal phase error. When the difference schemes fails, with same degrees of freedom as the spectral method, the spectral solution is still right. With the application of Extrema grid, even the most „exotic“ the boundary conditions can be handle easily, however the technique is quite general and robust.

Keywords: Spectral Methods; Galerkin-, Collocation Method; Chebyshev Polynomials; Fourier series; Time-dependent boundary value problems; convergence speed; phase error; programming techniques;

9. IRODALOMJEGYZÉK

- Augenbaum, J. M., 1989. An adaptive pseudospectral method for discontinuous problems. *Appl. Num. Math*, Volume 5, pp. 459-480.
- Babuška, I., Szabó, B. A. & Katz, I. N., 1981. The p-version of the finite element method. *SIAM J. Numer. Anal*, Volume 18, pp. 515-545.
- Basdevant, C. et al., 1986. Spectral and finite difference solution of the Burgers equation. *Comp. Fluids*, Volume 14, pp. 23-41.
- Bernardi, C., Dauge & Maday, Y., 1999. *Spectral Methods for Axisymmetric Domains*. Amsterdam: North-Holland.
- Blaisdell, G. A., Mansour, N. N. & Reynolds, W. C., 1993. Compressibility effects on the growth and structure of homogeneous turbulent shear flows. *J. Fluid Mech*, 256. kötet, pp. 443-485.
- Boyce, W. E. & DiPrima, R. C., 2012. *Elementary differential equations and boundary value problems*. 10th ed. Hoboken: John Wiley & Sons.
- Boyd, J. P., 1989. *Chebyshev and Fourier Spectral methods*. 1st ed. New York: Springer.
- Boyd, J. P., 2001. *Chebyshev and Fourier spectral methods*. 2nd ed. New York: Dover.
- Canuto, C., Hussaini, M. Y., Quarteroni, A. & Zang, T. A., 1988. *Spectral Methods in Fluid Dynamics*. New York: Springer.
- Canuto, C., Quarteroni, A., Hussaini, M. Y. & Zang, T. J. A., 2006. *Spectral Methods - Fundamentals in single domains*. Berlin: Springer-Verlag.
- Clenshaw, C. W., 1957. The numerical solution of linear differential equations in Chebyshev series. *Proc. Cambridge Philos. Soc*, Volume 53, pp. 134-149.
- Clenshaw, C. W. & Norton, H. J., 1963. The solution of nonlinear ordinary differential equations in Chebyshev series. *Comput. J*, Volume 6, pp. 88-92.
- Cohen, G. C., 2001. *Higher-order Numerical Methods for Transient Wave Equations*. Berlin: Springer.
- Deville, M. O., Fischer, P. F. & Mund, E. H., 2002. *High-Order Methods for Incompressible Fluid Flow*. Cambridge: Cambridge Univ. Press.
- Finlayson, B. A. & Scriven, L. E., 1966. The method of weighted residuals. *Appl. Mech. Rev*, Volume 19, pp. 735-748.
- Fornberg, B., 1966. *A Practical Guide to Pseudospectral Methods*. New York: Cambridge Univ. Press.
- Frazer, R. A., Jones, W. P. & Skan, S. W., 1937. *Approximation to Functions and to the Solution of Differential Equations*. Rep. and Mem. 1799, (Aeronautical Research Council, London).

Funaro, D., 1977. *Spectral Elements for Transport-dominated Equations*. Berlin: Springer.

Galerkin, B., 1915. Rods and plates: Series occurring in various questions concerning the elastic equilibrium of rods and plates. *Vestn. Inzhen*, Volume 19, pp. 897-908.

Gilbert, N. & Kleiser, L., 1990. Near-Wall Turbulence in Transition to Turbulence. In: S. J. Kline & N. H. Afgan, eds. *Near-Wall Turbulence: 1988 Toran Zaric Memorial Conference*. Washington: Hemisphere, pp. 7-27.

Gottlieb, D. & Hesthaven, J. S., 2001. Spectral methods for hyperbolic problems. *J. Comput. Appl. Math*, Volume 128, pp. 83-131.

Gottlieb, D. & Orszag, S. A., 1977. *Numerical Analysis of Spectral Methods: Theory and Applications*. Philadelphia: SIAM-CBMS.

Guo, B. & Babuška, I., 1986. The h-p version of the finite element method, Part 1: The basic approximation results. *Comp. Mech*, Volume 1, pp. 21-41.

Hao, Y. & Prosperetti, A., 1999. The dynamics of vapour bubbles in acoustic pressure fields. *Phys. Fluids*, 11 (8), pp. 2008-2019.

Hegedűs, F. et al., 2013. The effect of high viscosity on compressible and incompressible Rayleigh-Plesset-type bubble models. *Int.l J. Heat and Fluid Flow*, Volume 42, pp. 200-208.

Kamath, V. & Prosperetti, A., 1989. Numerical integration methods in a gas-bubble dynamics. *J. Acoust. Soc. Am*, 85(4), pp. 1538-1548.

Kantorovic, L. V., 1934. On a new method of approximate solution of partial differential equations. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, Volume 4, pp. 532-536.

Karniadakis, G. E. & Sherwin, S. J., 1999. *Spectral/hp Element Methods for Computational Fluid Dynamics*. 2nd ed. New York: Oxford Univ. Press.

Keller, J. B. & Miksis, M., 1980. Bubble oscillation of large amplitude. *J. Acoust. Soc. Am*, 68(2), pp. 628-633.

Kim, J., Moin, P. & Moser, R. D., 1987. Turbulent statistics in fully developed turbulent channel flow at low Reynolds number. *J. Fluid Mech*, Volume 177, pp. 133-166.

Kleiser, L. & Schumann, U., 1980. Treatment of Incompressibility and Boundary Conditions in 3-D Numerical Spectral Simulations of Plane Channel Flows. In: E. H. Hirschel, ed. *3rd GAMM Conf. Numerical Methods in Fluid Mechanics*. Braunschweig: Vieweg, pp. 165-173.

Kleiser, L. & Schumann, U., 1984. Spectral Simulation of the Laminar-Turbulent Transition Process in Plane Poiseuille Flow. In: R. G. Voigt, D. Gottlieb & M. Y. Hussaini, eds. *Spectral Methods for Partial Differential Equations*. Philadelphia: SIAM-CBMS, pp. 141-163.

Kreiss, H. -O. & Oliger, J., 1972. Comparison of accurate methods for integration of hyperbolic equations. *Tellus*, Volume 24, pp. 199-215.

- Lanczos, C., 1938. Trigonometric interpolation of empirical and analytical functions. *J. Math. Phys*, Volume 17, pp. 123-199.
- Lauterborn, W. & Engelbert, S., 1984. Bifurcation Superstructure in a Model of Acoustic Turbulence. *Phys. Rev. Lett*, 53(24).
- Mercier, B., 1981. *An Introduction to the Numerical Analysis*. Heidelberg: Springer.
- Orszag, S. A., 1971. Accurate solution of the Orr-Sommerfeld stability equation. *J. Fluid Mech*, Volume 50, pp. 689-703.
- Orszag, S. A., 1972. Comparison of pseudospectral and spectral approximations. *Stud. Appl. Math*, Volume 51, pp. 253-259.
- Orszag, S. A. & Kells, L. C., 1980. Transition to turbulence in plane Poiseuille flow and plane Couette flow. *J. Fluid Mech*, Volume 96, pp. 159-205.
- Orszag, S. A. & Patterson, J., 1972. Numerical simulation of three dimensional homogeneous isotropic turbulence. *Phys. Rev. Lett*, Volume 28, pp. 76-79.
- Patera, A. T., 1984. A spectral element method for fluid dynamics: laminar flow in a channel expansion. *J. Comput. Phys*, Volume 54, pp. 568-488.
- Prosperetti, A., Crum, L. A. & Commander, K. W., 1988. Nonlinear bubble dynamics. *J. Acoust. Soc. Am*, 83(2), pp. 502-514.
- Rogallo, R. S., 1977. *An ILLIAC Program for the Numerical Simulation of Homogeneous Incompressible Turbulence*, NASA TM-73203: .
- Rogers, M. M. & Moser, R. D., 1992. The three-dimensional evolution of a plane mixing layer: the Kelvin-Helmoltz rollup. *J. Fluid Mech*, Volume 243, pp. 183-226.
- Schwab, C., 1998. *p- and hp-Finite Element Methods*. Oxford: Oxford Univ. Press.
- Scotti, A. & Piomelli, U., 2001. Numerical simulation of pulsating turbulent channel flow. *Phys. Fluids*, Volume 13, pp. 1367-1384.
- Silberman, I., 1954. Planetary waves in the atmosphere. *J. Meteorol*, Volume 11, pp. 27-34.
- Slater, J. C., 1934. Electronic energy bands in metal. *Phys. Rev.*, Volume 45, pp. 794-801.
- Tadmor, E., 1988. Approximate Solutions of Nonlinear Conservation. In: A. Quarteroni, ed. *Advanced Numerical Approximation of Nonlinear Hyperbolic Equations*. (Heidelberg: Springer), pp. 1-150.
- Theofilis, V., 2000. Global linear instability in laminar separated boundary layer flow. In: H. F. Fasel, szerk. *Laminar-Turbulent Transition: IUTAM Symposium*. New York: Springer, pp. 663-668.
- Trefethen, L. N., 2000. *Spectral Methods in MATLAB*. Philadelphia: SIAM.
- Villadsen, J. V. & Stewart, W. E., 1967. Solution of boundary value problems by orthogonal collocation. *Chem. Eng. Sci*, Volume 22, pp. 1483-1501.
- Wright, K., 1964. Chebyshev collocation methods for ordinary differential equations. *Computer J*, Volume 6, pp. 358-365.

APPENDIX A. MATEMATIKAI ALAPOK

A.1. Lineáris terek és tulajdonságai

A.1.1. LINEÁRIS TEREK

Definíció: A V halmazt *vektortérnek* vagy *lineáris térnek* nevezzük, a T test felett, (ahol $T = \mathbb{R}$ vagy $T = \mathbb{C}$).

1.) Ha bármely két $x, y \in V$ elemhez egyértelműen hozzá tartozik $x + y \in V$ elem, melyet a kettő összegének nevezünk, úgy, hogy az összeadás rendelkezik a következő tulajdonságokkal bármely $x, y, z \in V$ esetén:

- kommutatív: $x + y = y + x$
- asszociatív: $(x + y) + z = x + (y + z)$
- létezik $0 \in V$, melyre: $x + 0 = x$
- additív inverzére $-x \in V$ igaz: $x + (-x) = 0$.

2.) Ha bármely $x \in V$ és $\alpha \in T$ -hez hozzá van rendelve az $\alpha \cdot x \in V$ elem, melyet skalárral való szorzásnak nevezünk, úgy hogy bármely $x, y \in V$, $\alpha, \beta, 1 \in T$ esetén a szorzat rendelkezik az alábbi tulajdonságokkal:

- kétféle módon disztributív: i.) $\alpha(x + y) = \alpha \cdot x + \alpha \cdot y$
ii.) $x(\alpha + \beta) = \alpha \cdot x + \beta \cdot x$
- asszociatív: $\alpha(\beta \cdot x) = (\alpha \cdot \beta)x$
- 1-el szorozva: $1 \cdot x = x$

A V vektortér elemeit általánosan *vektoroknak*, T testet a V *skalártartományának*, elemeit skalároknak nevezzük. Ha $T = \mathbb{R}$ valós, ha $T = \mathbb{C}$ komplex vektorterről beszélünk. (lásd Petz (2013)). Egyszerűbben megfogalmazva, a szokásos háromdimenziós terünk általánosítása több dimenzióra. V lineáris teret vektortérnek is nevezzük, viszont nem csak a geometria vektorok (irányított szakasz) alkothatnak vektorteret, hanem például a valós vagy komplex számok, mátrixok, vagy $[a, b]$ intervallumon folytonos függvények, habár ez kicsivel absztraktabb gondolkodást igényel. Ha az általános fogalmaktól idegenkedünk, akkor gondolhatunk közben a háromdimenziós tér helyvektoraira is.

A lineáris tér tetszőleges elemei: $x_1, x_2, \dots, x_N \in V$, a hozzájuk tartozó skalárok $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N \in T$, ekkor az:

$$\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \dots + \alpha_N x_N \in V, \quad (\text{A.1})$$

vektort *lineáris kombinációnak* nevezzük. Egy vektortér véges sok eleméről akkor mondjuk, hogy *lineárisan független*, ha lineáris kombinációjuk (A.1) csak úgy lehet nulla, ha minden skalár együttható nulla. Ellenkező esetben lineárisan függők. Egy

vektorteret N dimenziósnak nevezünk, ha létezik benne N lineárisan független vektor, de az N darabszám fölötti vektorrendszer már lineárisan függő. Az N db független vektort szokás bázisoknak is nevezni.

A tér *metrikus*, ha a halmaz elemei közt a *távolságfüggvény* (metrika) értelmezve van. A távolságfüggvénynek meg kell felelni az alábbi tulajdonságnak:

$$\begin{aligned} d(x, y) &\geq 0; \quad d(x, y) = 0 \quad \text{ha } x = y; \\ d(x, y) &= d(y, x); \\ d(x, z) &\leq d(x, y) + d(y, z). \end{aligned} \tag{A.2}$$

Ahol $x, y, z \in V$, $d(x, y)$ pedig a lineáris tér két eleme között definiált távolság. A távolságot többféle képen is definiálhatjuk. Erre mutatunk példát $x, y \in \mathbb{R}^2$ vektorok esetén:

$$\begin{aligned} d(x, y) &= \max_i |x_i - y_i|, \\ d(x, y) &= \sqrt{\sum_i (x_i - y_i)^2}, \end{aligned} \tag{A.3}$$

vagy $f(x), g(x) \in C(\mathbb{R})$ $[a, b]$ -n folytonos függvények esetén:

$$\begin{aligned} d(f, g) &= \max |f - g|, \\ d(f, g) &= \int_a^b |f - g| dx. \end{aligned} \tag{A.4}$$

Egy lineáris teret *normált térnek* nevezünk, ha a tér minden vektorának meg van adva a hossza. Tételezzük fel, hogy adott egy $\|\cdot\| : V \rightarrow \mathbb{R}_+$ leképezés a következő tulajdonságokkal:

$$\begin{aligned} \|x\| &\geq 0, \\ \|x\| &= 0, \quad \text{ha } x = 0, \\ \|\alpha \cdot x\| &= |\alpha| \cdot \|x\|, \\ \|x + y\| &\leq \|x\| + \|y\|, \\ d(x, y) &= \|x - y\|. \end{aligned} \tag{A.5}$$

Ekkor $\|\cdot\|$ -t *normának* (vagyis az origótól mért távolságnak) nevezzük. Az $\|x\|$ -t pedig az x vektor hosszaként értelmezzük. A normát diszkrét esetben, $x \in \mathbb{R}^2$:

$$\|x\| = \sqrt{\sum_i x_i^2}, \tag{A.6}$$

folytonos esetben, $f(x) \in C(\mathbb{R})$:

$$\|f(x)\| = \sqrt{\int_a^b f^2(x) \cdot dx} \tag{A.7}$$

határozhatjuk meg.

Egy vektortér két eleméhez hozzárendelt skalárt $\langle x, y \rangle : V \times V \rightarrow T$ a két elem skaláris szorzatának más néven *belső szorzatnak* nevezzük. A belső szorzat minden $x, y, z \in V$, és $\alpha \in T$ esetén rendelkezik az alábbi tulajdonságokkal:

$$\begin{aligned}\langle x, y \rangle &= \langle y, x \rangle, \\ \langle \alpha \cdot x, y \rangle &= \alpha \cdot \langle x, y \rangle, \\ \langle x + y, z \rangle &= \langle x, z \rangle + \langle y, z \rangle, \\ \langle x, x \rangle &> 0.\end{aligned}\tag{A.8}$$

A belső szorzat értelmezése vektorok esetén $x, y \in \mathbb{R}^N$ az Euklideszi térben ismert skaláris szorzat:

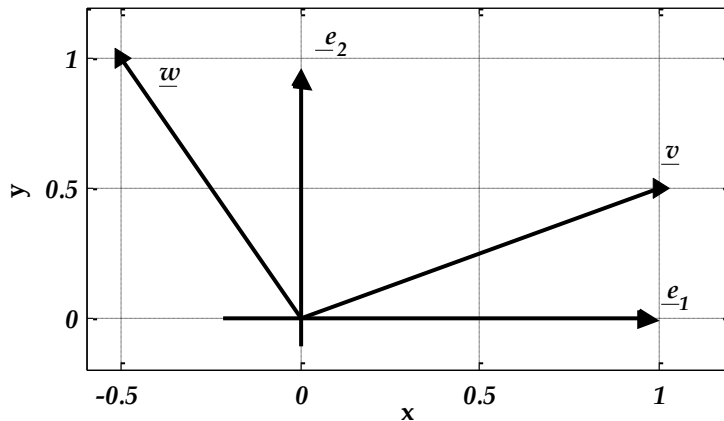
$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^N x_i \cdot y_i ,\tag{A.9}$$

mely általánosítható bármely lineáris vektortérben értelmezett: $f(x), g(x) \in C(\mathbb{R})$ $[a, b]$ - folytonos függvényekre:

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x) \cdot g(x) \cdot dx .\tag{A.10}$$

A.1.2. ORTOGONALITÁS

Az *ortogonalitás* elemi geometriában két térelem merőlegességét jelenti. Ezt a relációt szemlélteti az A.1. ábra, ahol $\underline{e}_1$ és $\underline{e}_2$ az x és y irányú egységnyi hosszú bázisvektorok, $\underline{v}$ és $\underline{w}$ két tetszőleges vektor.



A.1. ábra: Példa két vektor ortogonalitására

Ha $\underline{v}$ és $\underline{w}$ ortogonális akkor skaláris szorzatuk nulla:

$$\langle \underline{v}, \underline{w} \rangle = \sum_{i=1}^N v_i \cdot w_i = 0\tag{A.11}$$

Ezt a koordináta geometriában használt definíciót általánosítja a lineáris algebra ortogonalitás néven és terjeszti ki magasabb dimenziós vektorterekre, ahol a skalár szorzat értelmezve van. Azaz folytonos függvények is lehetnek ortogonálisak, ha belső szorzatuk nulla:

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x) \cdot g(x) \cdot dx = 0 \quad (\text{A.12})$$

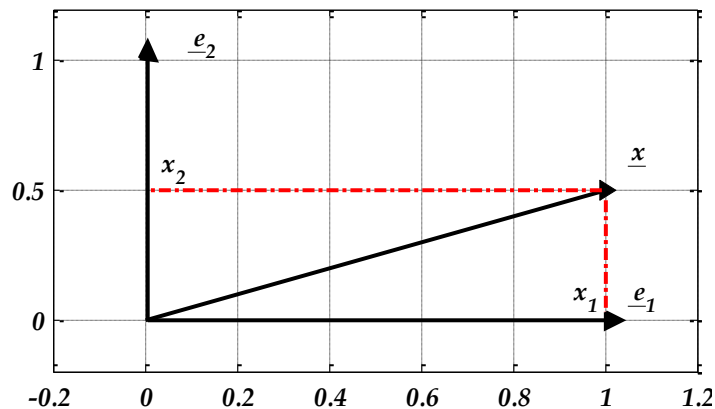
Egy vektortér lineárisan független bázisai *ortogonális bázisrendszert* alkotnak, ha a bázisok páronként ortogonálisak, azaz:

$$\langle \phi_i, \phi_j \rangle = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ \nu_i & i = j \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

ahol ϕ_i és ϕ_j két tetszőleges bázis, amik lehetnek vektorok vagy folytonos függvények is. Ha a bázisok ortogonálisak és egységnyi hosszúak, akkor a bázisok ortonormáltak is, ekkor $\nu_i = 1$.

A.1.3. ORTOGONÁLIS PROJEKCIÓ

Egy vektortér tetszőleges eleme felbontható a bázisfüggvények lineáris kombinációjára, ha a bázisaira merőlegesen vetítjük. Ezt a merőleges vetítést a lineáris algebra ortogonális projekciónak nevezzük. Az ortogonális projekciót szemlélteti az A.2. ábra. A két dimenzós vektorteret origó középpontú helyvektorok $\underline{x} \in \mathbb{R}^2$ alkotják, a bázisok pedig $\underline{e}_1$ és $\underline{e}_2$ egységnyi hosszúságúak.



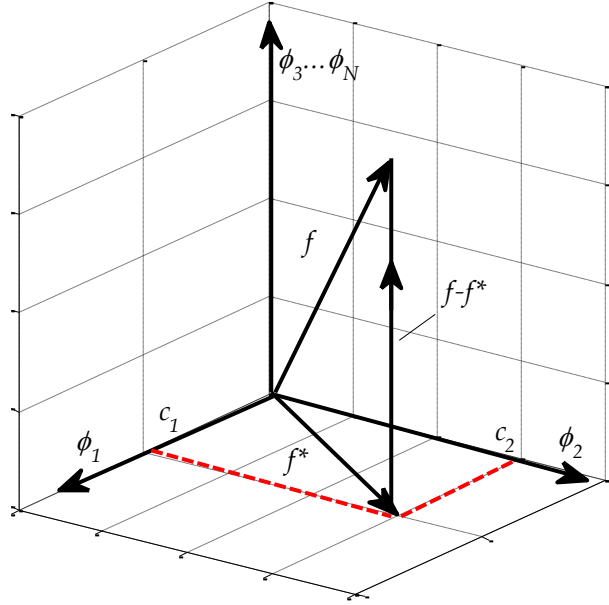
A.2. ábra: A vektortér egy tetszőleges elemének felbontása bázisfüggvények segítségével

A felbontás általánosítható magasabb N dimenziós lineáris terekre:

$$\underline{x} = \sum_{i=1}^N x_i \cdot \underline{e}_i \quad (\text{A.14})$$

Az ortogonális projekció, nem csak vektorok, hanem tetszőleges függvények esetén is igaz, olyan lineáris terekre ahol a belső (skaláris) szorzat értelmezve. Legyen

adott a $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N \in V$ N dimenziós ortogonális bázisrendszer és az $f \in V$ vektortér egy tetszőleges eleme lásd A.3. ábra



A.3. Ortogonális projekció, magyarázó ábra.

Az A.3. ábra alapján:

$$f^* = c_1 \cdot \phi_1 + c_2 \cdot \phi_2, \quad (\text{A.15})$$

ahol c_1 és c_2 a bázisfüggvények együtthatói. Mivel $f - f^*$ merőleges (ortogonális) az ϕ_1, ϕ_2 síkra ezért (A.13) alapján:

$$\langle f - f^*, \phi_1 \rangle = 0, \quad (\text{A.16})$$

$$\langle f - f^*, \phi_2 \rangle = 0. \quad (\text{A.17})$$

Az (A.15) egyenletet az (A.16) egyenletbe helyettesítve:

$$\begin{aligned} \langle f - c_1 \cdot \phi_1 - c_2 \cdot \phi_2, \phi_1 \rangle &= \\ \langle f, \phi_1 \rangle &= c_1 \langle \phi_1, \phi_1 \rangle + c_2 \underbrace{\langle \phi_2, \phi_1 \rangle}_0 \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Mivel a bázisok ortogonálisak ezért az (A.18) egyenletben szereplő $\langle \phi_2, \phi_1 \rangle$ tag nulla. Ebből c_1 együttható kifejezhető:

$$c_1 = \frac{\langle f, \phi_1 \rangle}{\langle \phi_1, \phi_1 \rangle}. \quad (\text{A.19})$$

A további együtthatók analóg módon számolhatók:

$$c_i = \frac{\langle f, \phi_i \rangle}{\langle \phi_i, \phi_i \rangle}. \quad (\text{A.20})$$

Ha a bázisok ortonormáltak is akkor az (A.20) egyenlet nevezőjében szereplő $\langle \phi_i, \phi_i \rangle = 1$.

APPENDIX B. DERIVÁLÓ MÁTRIXOK LEVEZETÉSE

B.1. Fourier rendszer

Ha Fourier rendszerben dolgozunk minden ismertett hálóra ugyanaz a Lagrange féle karakterisztikus bázis írható fel:

$$C_i(x) = \frac{1}{N} \sin\left(\frac{N(x-x_i)}{2}\right) \cdot \cot\left(\frac{x-x_i}{2}\right) \quad (\text{B.1})$$

Ennek az x szerinti deriváltja:

$$C_{i,x}(x) = \frac{1}{2} \cos\left(N \frac{x-x_i}{2}\right) \cdot \cot\left(\frac{x-x_i}{2}\right) - \frac{1}{2N} \sin\left(N \frac{x-x_i}{2}\right) \cdot \csc^2\left(\frac{x-x_i}{2}\right) \quad (\text{B.2})$$

Az így kapott függvény értékeit kell meghatároznunk az osztáspontokban. Ha a $i \neq j$ a deriváló mátrix $D_{i,j} = C_{i,x}(x_j)$ elemei $x = x_j$ behelyettesítéssel meghatározhatók:

$$x_j = \frac{2\pi \cdot j}{N} + \frac{1}{4} \frac{2\pi}{N} = \frac{\pi}{N} (2j + \varphi \cdot 2) \quad j = 0, 1, \dots, N-1 \quad (\text{B.3})$$

ahol φ az eltolás mértéke, konstans, „Extrema” hálón $\varphi = 0$, „Roots” hálón $\varphi = 1/2$ valamint a két bemutatott eltolt hálón $\varphi = 1/4$ és $\varphi = 3/4$. A koszinuszos tag egyszerűsíthető:

$$\cos\left(\frac{N}{2} \frac{\pi}{N} (2j - 2i)\right) = \cos((j-i)\pi) = (-1)^{j-i}. \quad (\text{B.4})$$

A szinuszos tag nullát ad eredményül:

$$\sin\left(\frac{N}{2} \frac{\pi}{N} (2j - 2i)\right) = \sin((j-i)\pi) = 0. \quad (\text{B.5})$$

Így a deriváló mátrix $D_{i,j}$ eleme, ha $i \neq j$:

$$D_{i,j} = (-1)^{j-i} \frac{1}{2} \cdot \cot\left(\frac{x_j - x_i}{2}\right). \quad (\text{B.6})$$

Ha $i = j$ a deriváló mátrix elemei határérték számítással (L'Hospital szabály) és trigonometrikus átalakítások felhasználásával határozható meg.

$$\begin{aligned}
\lim_{x \rightarrow x_i} C_{i,x}(x) &= \frac{1}{2} \cos\left(N \frac{x - x_i}{2}\right) \cdot \cot\left(\frac{x - x_i}{2}\right) - \frac{1}{2N} \sin\left(N \frac{x - x_i}{2}\right) \cdot \csc^2\left(\frac{x - x_i}{2}\right) = \\
\lim_{x \rightarrow x_i} \underbrace{\frac{1}{2} \cos\left(N \frac{x - x_i}{2}\right)}_1 \cdot \frac{\cos\left(\frac{x - x_i}{2}\right)}{\sin\left(\frac{x - x_i}{2}\right)} - \frac{1}{2N} \underbrace{\frac{\sin\left(N \frac{x - x_i}{2}\right)}{\sin\left(\frac{x - x_i}{2}\right)}}_N \cdot \frac{1}{\sin\left(\frac{x - x_i}{2}\right)} &= \\
&= \frac{1}{2} \lim_{x \rightarrow x_i} \frac{\overbrace{\frac{1}{2} \sin\left(\frac{x - x_i}{2}\right)}^0}{\underbrace{\frac{1}{2} \cos\left(\frac{x - x_i}{2}\right)}_1} = 0
\end{aligned} \tag{B.7}$$

A teljes deriváló mátrix Fourier bázisra:

$$D_{i,j} = \begin{cases} 0 & i = j \\ (-1)^{j-i} \cdot 0.5 \cdot \cot[0.5(x_j - x_i)] & i \neq j \end{cases} \tag{B.8}$$

Az így kapott deriváló mátrix alkalmazható bármilyen hálóeltolás esetén.

B.2. Chebyshev rendszer

A differenciáló mátrixok levezetéséhez szükség lesz a Chebyshev polinom trigonometrikus alakban történő felírására:

$$T_N(x) = \cos(N\theta), \tag{B.9}$$

ahol $\theta = \arccos(x)$, valamint a Chebyshev polinom első második és harmadik deriváltjára:

$$T_{N,x}(x) = \frac{N \sin(N\theta)}{\sin \theta}, \tag{B.10}$$

$$T_{N,xx}(x) = -\frac{N^2 \cos(N\theta)}{\sin^2 \theta} + \frac{N \sin(N\theta)}{\sin^3 \theta} \cos \theta, \tag{B.11}$$

$$\begin{aligned}
T_{N,xxx}(x) &= -\frac{3N^2 \cos(N\theta)}{\sin^4 \theta} \cos \theta + \frac{3N \cos^2 \theta \sin(N\theta)}{\sin^5 \theta} + \\
&\quad \frac{N \sin(N\theta)}{\sin^3 \theta} - \frac{N^3 \sin(N\theta)}{\sin^{3\theta}}
\end{aligned} \tag{B.12}$$

A deriváltak értékei a számítási tartomány szélein:

$$T_{N,x}(\pm 1) = N^2 \cdot (\pm 1)^{N+1}, \tag{B.13}$$

$$T_{N,xx}(1) = \frac{N^4 - N^2}{3}, \tag{B.14}$$

$$T_{N,xx}(-1) = (-1)^N \frac{N^4 - N^2}{3}. \tag{B.15}$$

A levezetések során gyakran alkalmazzuk az alábbi trigonometrikus összefüggést:

$$\sin \arccos(x) = \sqrt{1-x^2} . \quad (\text{B.16})$$

B.2.1. ROOTS GRID

A Roots gridre levezetett Lagrange féle karakterisztikus bázisra az alábbi összefüggést kaptuk:

$$C_i(x) = \frac{T_{N+1}(x)}{T_{N+1,x}(x_i) \cdot (x - x_i)} , \quad (\text{B.17})$$

ezt x szerint deriváljuk:

$$C_{i,x}(x) = \frac{1}{T_{N+1,x}(x_i)} \left[\frac{T_{N+1,x}(x)(x - x_i) - T_{N+1}(x)}{(x - x_i)^2} \right] . \quad (\text{B.18})$$

A deriváló mátrix $D_{i,j} = C_{i,x}(x_j)$ elemeit, ha $i \neq j$ $x = x_j$ helyettesítéssel határozzuk meg, ahol

$$x_j = \cos\left(\pi \frac{2j+1}{2 \cdot (N+1)}\right) \quad j = 0, 1, \dots, N . \quad (\text{B.19})$$

A $T_{N+1}(x)$ Chebyshev polinom értéke az x_j helyen nulla, mivel a Roots háló esetén osztáspontok pontosan az $N+1$ -ed fokú Chebyshev polinom zérus helyei. Ez bizonyítható, ha a trigonometrikus alakba (B.9) behelyettesítjük az osztáspontokat kifejező (B.19) egyenletet:

$$T_{N+1}(x_j) = \cos\left((N+1) \cdot \frac{2j+1}{2(N+1)} \pi\right) = \cos\left(\frac{2j+1}{2} \pi\right) = 0 . \quad (\text{B.20})$$

Az előbbihez hasonlóan az első derivált is kifejezhető, (B.10)-be a (B.19) -et helyettesítve a felhasználva (B.16) trigonometrikus összefüggést:

$$T_{N+1,x}(x_j) = \frac{(N+1) \sin\left[(N+1) \cdot \left(\frac{2j+1}{2(N+1)} \pi\right)\right]}{\sqrt{1-x_j^2}} = (-1)^j \frac{N+1}{\sqrt{1-x_j^2}} \quad (\text{B.21})$$

Természetesen x_i -re analóg összefüggéseket kapunk. A $T_{N+1}(x_j)$ és $T_{N+1,x}(x_j)$ kifejezésekre kapott képleteket a (B.18) egyenletbe helyettesítve a deriváló mátrix $D_{i,j} = C_{i,x}(x_j)$ eleme:

$$C_{i,x}(x_j) = (-1)^i \frac{\sqrt{1-x_i^2}}{N+1} \cdot (-1)^j \frac{N+1}{\sqrt{1-x_j^2} \cdot (x_j - x_i)} = (-1)^{i+j} \frac{\sqrt{(1-x_i^2)/(1-x_j^2)}}{x_j - x_i} \quad (\text{B.22})$$

Ha $i = j$ kicsivel bonyolultabb meghatározni a mátrix elemeit (átló), a nevezőben szereplő $(x_i - x_j)$ miatt, mivel ez nullával osztást eredményezne. Első lépésként írjuk fel a $T_{N+1}(x)$ Taylor sorát x_j környezetében a második tagtól elhagyva:

$$T_{N+1}(x) \cong \underbrace{T_{N+1}(x_j)}_0 + T_{N+1,x}(x_j)(x - x_j) + \frac{1}{2} T_{N+1,xx}(x_j)(x - x_j)^2, \quad (\text{B.23})$$

ahol az első tag $T_{N+1}(x_j) = 0$, ahogy ezt fentebb már beláttuk. A Taylor sort a (B.18) egyenletbe helyettesítjük:

$$C_{i,x}(x) = \frac{1}{T_{N+1,x}(x_i)} \left[\frac{T_{N+1,x}(x)(x - x_i) - T_{N+1,x}(x_j)(x - x_j) - \frac{1}{2} T_{N+1,xx}(x_j)(x - x_j)^2}{(x - x_i)^2} \right]. \quad (\text{B.24})$$

Ha $x \rightarrow x_i = x_j$ akkor a (B.24) egyenlet zárójelén belül lévő első és második tagja ki-eegyszerűsíthető, mivel végtelenbe tartó, egymással megegyező ellentétes előjelű függvények, közös határértékük így nulla. Az egyszerűsítés után:

$$C_{j,x}(x_j) = \frac{1}{2} \frac{T_{N+1,xx}(x_j)}{T_{N+1,x}(x_j)} \quad (\text{B.25})$$

adódik. A nevezőt már (B.21) egyenlettel meghatároztuk. A számláló a korábbiakhoz hasonlóan (B.11) egyenletbe a (B.19) és (B.16) összefüggést helyettesítve meghatározható:

$$T_{N+1,xx}(x_j) = \frac{(N+1) \cdot (-1)^j}{(1 - x_j^2)^{3/2}} x_j. \quad (\text{B.26})$$

A nevezőre és számlálóra kapott összefüggéseket behelyettesítve a deriváló mátrix $D_{j,j} = C_{j,x}(x_j)$ eleme:

$$C_j(x_j) = \frac{\overbrace{(-1)^{2j}}^1 \sqrt{1 - x_j^2} (N+1) \cdot x_j}{2 \cdot (N+1) \cdot (1 - x_j^2)^{3/2} \cdot (N+1)} = \frac{1}{2} \cdot \frac{x_j}{1 - x_j^2}. \quad (\text{B.27})$$

A teljes deriváló mátrix:

$$D_{i,j} = \begin{cases} 0.5 \cdot x_j / (1 - x_j^2)^2 & i = j \\ (-1)^{i+j} \frac{\sqrt{(1 - x_i^2) / (1 - x_j^2)}}{x_j - x_i} & i \neq j \end{cases}. \quad (\text{B.28})$$

B.2.2. EXTREMA GRID

Extrema hálón az alábbi Lagrange féle karakterisztikus bázist vezettük le:

$$C_i(x) = \frac{(1-x^2) \cdot T_{N,x}(x)}{[(1-x_i^2) \cdot T_{N,x}(x_i)]_x \cdot (x-x_i)}. \quad (B.29)$$

Az osztáspontok:

$$x_j^T = [1, \quad T_{N,x}(x) = 0, \quad -1], \quad (B.30)$$

melyek az alábbi trigonometrikus összefüggéssel is kifejezhetők:

$$x_j = \cos\left(\frac{\pi \cdot j}{N}\right) \quad j = 0, 1, \dots, N. \quad (B.31)$$

A $T_{N,x}(x_i)$ értéke függ attól, hogy melyik x_i osztáspontban vagyunk. Az $i = 1, 2, \dots, N-1$ interpolációs pontok a $T_{N,x}(x_i)$ zérus helyei itt nullát kapunk eredményül (bizonyítható (B.20) levezetéshez hasonlóan), a két szélső pontban ($x_0 = 1$ és $x_N = -1$) pedig (B.13) alapján határozzuk meg $T_{N,x}(x_i)$ helyettesítési értékét:

$$T_{N,x}(x_i) = \begin{cases} N^2 & i = 0 \\ 0 & i = 1, \dots, N-1 \\ (-1)^{N+1} N^2 & i = N \end{cases} \quad (B.32)$$

Ezt felhasználva a (B.29) egyenlet nevezője, ha $i = 0$, $x_0 = 1$

$$\begin{aligned} [(1-x_i^2) \cdot T_{N,x}(x_i)]_x &= -2x_i \cdot T_{N,x}(x_i) + (1-x_i^2) \cdot T_{N,xx}(x_i) = \\ &= -2 \cdot \underbrace{T_{N,x}(1)}_{N^2} + \underbrace{(1-1^2) \cdot T_{N,xx}(1)}_0 = -2N^2. \end{aligned} \quad (B.33)$$

Ha $i = N$, $x_N = -1$:

$$\begin{aligned} [(1-x_i^2) \cdot T_{N,x}(x_i)]_x &= -2x_i \cdot T_{N,x}(x_i) + (1-x_i^2) \cdot T_{N,xx}(x_i) = \\ &= -2 \cdot (-1) \cdot \underbrace{T_{N,x}(-1)}_{(-1)^{N+1} N^2} + \underbrace{(1-1^2) \cdot T_{N,xx}(-1)}_0 = 2 \cdot (-1)^{N+1} N^2 \end{aligned} \quad (B.34)$$

Ha $i = 1, 2, \dots, N-1$ esetén az első tag zérus, viszont a második taghoz ki kell fejeznünk $T_{N,xx}(x_i)$ -t. A Chebyshev polinom x szerinti második deriváltjába (B.11) az osztáspontokat kifejező összefüggést (B.31) helyettesítjük, és felhasználjuk a (B.16) trigonometrikus azonosságot:

$$\begin{aligned} T_{N,xx}(x_i) &= -\frac{N^2 \cos(N\theta)}{\sin^2 \theta} + \frac{N \sin(N\theta)}{\sin^3 \theta} \cos \theta = \\ &= -\frac{N^2 \cos\left(N \frac{\pi \cdot i}{N}\right)}{\sin^2 \arccos x_i} + \frac{\overbrace{N \sin\left(N \frac{\pi \cdot i}{N}\right)}^0}{\sin^3 \arccos x_i} \cos \arccos x_i = \\ &= -\frac{N^2 \cos(\pi \cdot i)}{(1-x_i^2)} = (-1)^{j+1} \frac{N^2}{(1-x_i^2)} \end{aligned} \quad (B.35)$$

Ezzel a nevezőben szereplő konstans tag:

$$\begin{aligned} [(1-x_i^2) \cdot T_{N,x}(x_i)]_x &= -2x_i \cdot \underbrace{T_{N,x}(x_i)}_0 + (1-x_i^2) \cdot T_{N,xx}(x_i) = \\ (1-x_i^2) \cdot (-1)^{i+1} \frac{N^2}{(1-x_i^2)} &= (-1)^{i+1} N^2. \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

A felírt kifejezéseket ((B.33) (B.34) és (B.36)) behelyettesítve a (B.29) egyenletbe, bevezetve:

$$c_i = \begin{cases} 1 & 0 < i < N \\ 2 & i = 0 = N \end{cases}, \quad (\text{B.37})$$

a Lagrange féle karakterisztikus bázisfüggvény az alábbi formába írható:

$$C_i(x) = (-1)^{i+1} \frac{(1-x^2) \cdot T_{N,x}(x)}{c_i \cdot N^2 \cdot (x-x_i)}. \quad (\text{B.38})$$

A karakterisztikus bázis e formája található meg szakirodalomban: Boyd (2001), Canuto et al. (2006). A (B.38) függvényt x szerint deriváljuk:

$$C_{i,x}(x_j) = \frac{(-1)^{i+1}}{c_i \cdot N^2} \left[\underbrace{\frac{-2x \cdot T_{N,x}(x)}{(x-x_i)}}_{\text{I.}} + \underbrace{\frac{(1-x^2) \cdot T_{N,xx}(x)}{(x-x_i)}}_{\text{II.}} - \underbrace{\frac{(1-x^2) \cdot T_{N,x}(x)}{(x-x_i)^2}}_{\text{III.}} \right]. \quad (\text{B.39})$$

Az előzőektől eltérően itt négy különböző esetleg lehetséges (mivel a szélső pontok nem zérus helyek). Ha $j \neq i$, de $0 < j < N$, akkor x_j a $T_{N,x}(x)$ zérus helyei, ezért a (B.39) zárójelében lévő tagok közül az I.) és a III.) tag nulla. A $T_{N,xx}(x_j)$ Chebyshev polinom második deriváltja (B.35) kifejezéssel analóg felírható. Ezzel a deriváló mátrix $D_{i,j} = C_{i,x}(x_j)$ elemei:

$$C_{i,x}(x_j) = \frac{(-1)^{i+1}}{c_i \cdot N^2} \cdot \frac{(1-x_j^2) \cdot T_{N,xx}(x_j)}{(x_j-x_i)} = \frac{(-1)^{i+1}}{c_i \cdot N^2} \frac{(1-x_j^2) \cdot N^2 (-1)^{j+1}}{(1-x_j^2)(x_j-x_i)} = \frac{(-1)^{j+1}}{c_j(x_j-x_i)} \quad (\text{B.40})$$

Ha $j \neq i$ és $j = 0$ akkor $x_j = 1$, így (B.39) II.) és III.) tagja nulla a számlálóban szereplő $(1-x^2)$ szorzótényező miatt. Az I.) tagban szereplő $-2x_0 \cdot T_{N,x}(x_0) = -2N^2$, ahogy ezt már (B.33)-nál is láttuk. A deriváló mátrix eleme:

$$C_{i,x}(x_0) = \frac{(-1)^{i+1}}{c_i \cdot N^2} \cdot \frac{-2N^2}{(x_0-x_i)} = \frac{-2 \cdot (-1)^{i+1}}{c_i(x_0-x_i)}. \quad (\text{B.41})$$

Ehhez hasonlóan, ha $j \neq i$ és $j = N$, akkor $x_j = -1$ így a II.) és III.) tagok szintén nullák, az I.) tag számlálója pedig: $-2x_N \cdot T_{N,x}(x_N) = -2 \cdot (-1)^{N+1} N^2$, ekkora a deriváló mátrix eleme:

$$C_{i,x}(x_N) = \frac{(-1)^{i+1}}{c_i \cdot N^2} \cdot \frac{-2 \cdot (-1)^{N+1} N^2}{(x_N-x_i)} = \frac{-2 \cdot (-1)^{i+N}}{c_i(x_N-x_i)}. \quad (\text{B.42})$$

A deriváló mátrix (B.40), (B.41) és (B.42) elemei most is csak egy c_j (lásd (B.37)) konstansban különböznek, ezért a $j \neq i$ elemek a bevezetett konstans segítségével egyszerűbben is felírhatók:

$$C_{i,x}(x_j) = \frac{(-1)^{i+j} c_j}{c_i(x_j - x_i)}, \quad (\text{B.43})$$

ahol $c_0 = c_N = 2$ és $c_i = c_j = 1$ ha $0 < i, j < N$.

Ha $i = j \neq 0 \neq N$ az elemek behelyettesítése nem vezet megoldásra, hiszen a nevezőben nullával osztást eredményezne, határértékük pedig végtelenbe tart. Azért, hogy ezt elkerüljük, a tagokat egy kicsit átalakítjuk. Írjuk fel $T_{N,x}(x)$ Taylor sorát x_j körül a második tagig:

$$T_{N,x}(x) \cong \underbrace{T_{N,x}(x_j)}_0 + T_{N,xx}(x_j)(x - x_j) + \frac{1}{2} T_{N,xxx}(x_j)(x - x_j)^2. \quad (\text{B.44})$$

Ezt a Taylor sort helyettesítsük a (B.39) egyenlet harmadik tagjába. (Csak a szögletes zárójelen belüli tagokat írjuk):

$$\underbrace{\frac{-2x \cdot T_{N,x}(x)}{(x - x_i)}}_{I.} + \underbrace{\frac{(1 - x^2) \cdot T_{N,xx}(x)}{(x - x_i)}}_{II.} - \underbrace{\frac{(1 - x^2)}{(x - x_i)^2} \cdot \left(T_{N,xx}(x_j)(x - x_j) + \frac{1}{2} T_{N,xxx}(x_j)(x - x_j)^2 \right)}_{III.} \quad (\text{B.45})$$

A szorzás elvégzése után:

$$\frac{-2x \cdot T_{N,x}(x)}{(x - x_i)} + \frac{(1 - x^2) \cdot T_{N,xx}(x)}{(x - x_i)} - \frac{(1 - x^2) \cdot T_{N,xx}(x_j)}{(x - x_i)} - \frac{1}{2} (1 - x^2) \cdot T_{N,xxx}(x_j). \quad (\text{B.46})$$

A (B.46) egyenlet második és harmadik tagja kiegyeszerősödik, mivel ha $x \rightarrow x_i = x_j$, a két tag egyenlő egymással és ellentétes előjellel szerepelnek, határértékben plusz és mínusz végtelenbe tartanak, közös határértékük pedig nulla. Csak az első és utolsó tag marad:

$$\frac{-2x \cdot T_{N,x}(x)}{(x - x_i)} - \frac{(1 - x^2) \cdot T_{N,xxx}(x_j)}{2}. \quad (\text{B.47})$$

A (B.47) második tagja innen már számolható, már csak az első tagban szereplő $(x - x_i)$ nevezőt kell kiejteni. Ez szintén Taylor sorfejtés segítségével történik, most viszont csak az első tagig kell vennünk az elemeket, mivel a magasabb rendű tagok $\frac{1}{k!} \frac{d^k}{dx^k} T_{N,x}(x_i)(x - x_i)^k$ $k > 1$, nullát adnának eredményül $(x - x_i)^k$ szorzó tényezőbe $x = x_i$ helyettesítés miatt. $T_{N,x}(x)$ -et Taylor sorral kifejezve az egyenlet tovább egyszerűsödik:

$$-2x \cdot T_{N,xx}(x_j) - \frac{(1 - x^2) \cdot T_{N,xxx}(x_j)}{2}. \quad (\text{B.48})$$

Megjegyzendő, hogy az első tag (eredeti egyenletben I.)-el jelölt) 0/0 típusú határérték, ezért L'Hospital szabály alkalmazásával is ezt az eredményt kapnánk, viszont az

eredeti egyenlet III.) tagja esetén, ami szintén 0/0 típusú határérték nem teljesül a L'Hospital szabály alkalmazásának feltétele:

$$\lim_{x \rightarrow c} \frac{f(x)}{g(x)} = \lim_{x \rightarrow c} \frac{f'(x)}{g'(x)} = A \quad g'(c) \neq 0, \quad (\text{B.49})$$

mivel a nevezőben továbbra is $2 \cdot (x - x_i)$, $x \rightarrow x_i$ szerepel, ami szintén nullát ad eredményül, míg a II.) tag végtelenbe tartana, így szükség volt valamilyen átalakítás, hogy ezt kiküszöböljük. A (B.48) egyenletbe behelyettesítve az osztópontokat már meg tudjuk határozni a mátrix átlójának elemeit:

$$C_{j,x}(x_j) = \frac{(-1)^{i+1}}{c_i \cdot N^2} \left[-2x \cdot T_{N,xx}(x_j) - \frac{(1-x^2) \cdot T_{N,xxx}(x_j)}{2} \right]. \quad (\text{B.50})$$

A $T_{N,xx}(x_j)$ elem a (B.35) kifejezéssel analóg módon felírható, a $T_{N,xxx}(x_j)$ meghatározásához felhasználjuk a Chebyshev polinom harmadik x szerinti deriváltjára (B.12) felírt összefüggést. A $T_{N,xx}(x_j)$ kapcsán már láttuk, hogy a szinuszos tagok nullák ezért:

$$T_{N,xxx}(x_j) = -\frac{3N^2 \cos(j\pi)}{(1-x_j^2)^2} x_j = (-1)^{j+1} \frac{3N^2}{(1-x_j^2)^2} x_j. \quad (\text{B.51})$$

Behelyettesítés után a deriváló mátrix $D_{j,j} = C_{j,x}(x_j)$ eleme:

$$C_{j,x}(x_j) = \frac{(-1)^{j+1}}{N^2} \left[\frac{(-1)^{j+1} 2x_j \cdot N^2}{(1-x_j^2)} - \frac{(1-x_j^2)(-1)^{j+1} 3x_j N^2}{2 \cdot (1-x_j^2)^2} \right] = -\frac{x_j}{2 \cdot (1-x_j^2)}. \quad (\text{B.52})$$

Már csak a mátrix átlójának két szélső pontját $i = j = 0$ és $i = j = N$ kell meghatározunk. Tekintsük újra a Lagrange bázis deriváltját (B.39). A III.) tag nevezőjét Taylor sorba fejtsük x_j körül a második tagtól elhagyva:

$$\begin{aligned} (1-x^2)T_{N,x}(x) &\cong \underbrace{(1-x_j^2)T_{N,x}(x_j)}_0 + [(1-x_j^2)T_{N,x}(x_j)]_x (x-x_j) + \\ &\quad \frac{1}{2} [(1-x_j^2)T_{N,x}(x_j)]_{xx} (x-x_j)^2. \end{aligned} \quad (\text{B.53})$$

A Taylor sor első eleme nulla, mivel x_j osztáspontokat az $(1-x^2) \cdot T_{N,x}(x)$ függvény zérus helyeiként definiáltuk (lásd: 2.2.2.2 fejezet, Extrema háló ismertetése). Fejtsük ki a Taylor sorban szereplő deriváltakat:

$$\begin{aligned} (1-x^2)T_{N,x}(x) &\cong [-2x_j \cdot T_{N,x}(x_j) + (1-x_j^2) \cdot T_{N,xx}(x_j)](x-x_j) + \\ &\quad [-2 \cdot T_{N,x}(x_j) - 2x_j \cdot T_{N,xx}(x_j) - 2x_j \cdot T_{N,xx}(x_j) + (1-x_j^2) \cdot T_{N,xxx}(x_j)] \frac{(x-x_j)^2}{2}. \end{aligned} \quad (\text{B.54})$$

Tekintsük a (B.39) egyenlet szögletes zárójelen belüli részét, a III.) tagjának nevezőjébe helyettesítsük be a (B.54) Taylor sort:

$$\begin{aligned} & \underbrace{\frac{-2x \cdot T_{N,x}(x)}{(x-x_j)}}_1 + \underbrace{\frac{(1-x^2) \cdot T_{N,xx}(x)}{(x-x_j)}}_2 - \\ & \left(\underbrace{\frac{-2x_j \cdot T_{N,x}(x_j)}{(x-x_j)}}_3 + \underbrace{\frac{(1-x_j^2) \cdot T_{N,xx}(x_j)}{(x-x_j)}}_4 - \underbrace{T_{N,x}(x_j)}_5 - \underbrace{x_j \cdot T_{N,xx}(x_j)}_6 \right. \\ & \left. \underbrace{-x_j \cdot T_{N,xx}(x_j)}_7 + \underbrace{\frac{(1-x_j^2)}{2} \cdot T_{N,xxx}(x_j)}_8 \right). \end{aligned} \quad (\text{B.55})$$

A korábbi megfontolások alapján a (B.55) egyenletben szereplő tagok közt is találunk ellentétes előjelű azonos $x \rightarrow x_j$ esetén plusz és mínusz végtelenbe tartó függvényeket, amelyek páronként nullát adnak határértékül. Ezek az 1.-3.) és 2.-4.) függvény-párok. Mivel $x_0=1$ és $x_N=-1$ a 8.) tag mindkét esetben nulla. A 6.) és 7.) tag pedig összevonható. Ezzel sikeresen kezelhető formájú alakra hoztuk a (B.39) szögletes zárójelében szereplő tagokat:

$$C_{j,x}(x_j) = \frac{(-1)^j}{2 \cdot N^2} [2x_j \cdot T_{N,xx}(x_j) + T_{N,x}(x_j)]. \quad (\text{B.56})$$

Felhasználva a (B.13) (B.14) és (B.15) összefüggést, ha $x_j = x_0 = 1$:

$$C_{0,x}(x_0) = \frac{1}{2 \cdot N^2} \left[\frac{2N^4 - 2N^2}{3} + N^2 \right] = \frac{2N^2 + 1}{6}, \quad (\text{B.57})$$

ha $x_j = x_N = -1$:

$$C_{N,x}(x_N) = \frac{(-1)^N}{2 \cdot N^2} \left[(-1)^{N+1} \frac{2N^4 - 2N^2}{3} + (-1)^{N+1} N^2 \right] = -\frac{2N^2 + 1}{6} \quad (\text{B.58})$$

Ezzel a $D_{i,j} = C_{i,x}(x_j)$ deriváló mátrix minden elemét meghatároztuk, összefoglalva:

$$D_{i,j} = \begin{cases} (2N^2 + 1)/6 & i = j = 0 \\ -(2N^2 + 1)/6 & i = j = N \\ -x_j / 2(1 - x_j^2) & i = j \neq 0 \neq N \\ (-1)^{i+j} c_j / c_i (x_j - x_i) & i \neq j \end{cases}, \quad (\text{B.59})$$

ahol $c_0 = c_N = 2$ és $c_i = c_j = 1$ ha $0 < i, j < N$.

APPENDIX C. A BUBORÉKMODELLHEZ KAPCSOLÓDÓ LEVEZETÉSEK

C.1. Koordináta transzformáció

C.1.1. ENERGIAEGYENLET A BUBORÉK BELSEJÉBEN

A buborék belsejére felírt (5.4) energiaegyenletet a hőmérséklet idő szerinti deriváltjára rendezzük át:

$$\frac{\partial T_G}{\partial t} = C_1 \dot{p}_G - u_G \frac{\partial T_G}{\partial r} + C_1 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_G r^2 \frac{\partial T_G}{\partial r} \right), \quad (\text{C.1})$$

ahol:

$$C_1 = \frac{\kappa - 1}{\kappa} \frac{T_G}{p_G}, \quad (\text{C.2})$$

$$u_G = \frac{1}{\kappa \cdot p_G} \left((\kappa - 1) \cdot \lambda_G \frac{\partial T_G}{\partial r} - \frac{1}{3} r \cdot \dot{p}_G \right). \quad (\text{C.3})$$

Az $y = r / R(t)$ koordináta transzformáció elvégzése után a $y = y(r, t)$ deriváltjai:

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -\frac{r \dot{R}}{R^2} = -y \frac{\dot{R}}{R}; \quad \frac{\partial y}{\partial r} = \frac{1}{R}; \quad \frac{\partial^2 y}{\partial r^2} = 0. \quad (\text{C.4})$$

Ezzel $T_G(r, t)$ deriváltjai kifejezhetőek:

$$\frac{\partial T_G(y(r, t), t)}{\partial t} = \frac{\partial T_G(y, t)}{\partial t} + \frac{\partial T_G(y, t)}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} = \frac{\partial T_G}{\partial t} - y \frac{\dot{R}}{R} \frac{\partial T_G}{\partial r}. \quad (\text{C.5})$$

$$\frac{\partial T_G(y(r, t), t)}{\partial r} = \frac{\partial T_G(y, t)}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial r} = \frac{1}{R} \frac{\partial T_G}{\partial y}. \quad (\text{C.6})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_G(T_G, p_G) r^2 \frac{\partial T_G(y(r, t), t)}{\partial r} \right) &= 2r \lambda_G \frac{\partial T_G}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial r} + r^2 \cdot \left(\frac{\partial \lambda_G}{\partial T_G} \frac{\partial T_G}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial r} + \right. \\ &\left. \frac{\partial \lambda_G}{\partial p_G} \frac{\partial p_G}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial r} \right) \cdot \frac{\partial T_G}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial r} + r^2 \lambda_G \frac{\partial^2 T_G}{\partial y^2} \left(\frac{\partial y}{\partial r} \right)^2 + r^2 \lambda_G \frac{\partial T_G}{\partial y} \frac{\partial^2 y}{\partial r^2} = 2Ry \lambda_G \frac{\partial T_G}{\partial y} \frac{1}{R} + \\ R^2 y^2 \left(\frac{\partial \lambda_G}{\partial T_G} \frac{\partial T_G}{\partial y} \frac{1}{R} + \frac{\partial \lambda_G}{\partial p_G} \frac{\partial p_G}{\partial y} \frac{1}{R} \right) \frac{\partial T_G}{\partial y} \frac{1}{R} + R^2 y^2 \lambda_G \frac{\partial^2 T_G}{\partial y^2} \left(\frac{1}{R} \right)^2 + R^2 y^2 \lambda_G \frac{\partial T_G}{\partial y} 0 = \\ 2y \lambda_G \frac{\partial T_G}{\partial y} + y^2 \left(\frac{\partial \lambda_G}{\partial T_G} \frac{\partial T_G}{\partial y} + \frac{\partial \lambda_G}{\partial p_G} \frac{\partial p_G}{\partial y} \right) \frac{\partial T_G}{\partial y} + y^2 \lambda_G \frac{\partial^2 T_G}{\partial y^2} &= \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_G y^2 \frac{\partial T_G}{\partial y} \right). \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

A deriváltakra kapott összefüggéseket felhasználva (C.1) energia egyenlet felírható az alábbi formában:

$$\frac{\partial T_G}{\partial t} = C_1 \dot{p}_G - \left(y \frac{\dot{R}}{R} - u_G \frac{1}{R} \right) \frac{\partial T_G}{\partial y} + C_1 \frac{1}{R^2 y^2} \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_G y^2 \frac{\partial T_G}{\partial y} \right), \quad (C.8)$$

ahol:

$$C_1 = \frac{\kappa - 1}{\kappa} \frac{T_G}{p_G}, \quad (C.9)$$

$$u_G = \frac{1}{\kappa \cdot p_G} \left((\kappa - 1) \cdot \lambda_G \frac{1}{R} \frac{\partial T_G}{\partial y} - \frac{1}{3} y \cdot R \cdot \dot{p}_G \right). \quad (C.10)$$

C.1.2. ENERGIAEGYENLET A FOLYADÉK TÉRBEN

A folyadéktérre felírt energiaegyenletet (5.6) a hőmérséklet idő szerinti deriváltjára rendezve:

$$\frac{\partial T_L}{\partial t} = -u_L \frac{\partial T_L}{\partial r} + C_2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_L r^2 \frac{\partial T_L}{\partial r} \right), \quad (C.11)$$

ahol:

$$C_2 = \frac{1}{\rho_L c_{pL}}, \quad (C.12)$$

$$u = \dot{R} \left(\frac{R}{r} \right)^2. \quad (C.13)$$

Az alábbi koordináta transzformációt hajtjuk végre: $z = R(t)/r$. Először meghatározzuk $z = z(r, t)$ deriváltjait.

$$\frac{\partial z}{\partial t} = \frac{\dot{R}}{r} = z \frac{\dot{R}}{R}; \quad \frac{\partial z}{\partial r} = -\frac{R}{r^2} = -z \frac{1}{r}; \quad \frac{\partial^2 z}{\partial r^2} = \frac{2R}{r^3} = z^3 \frac{2}{R^2}. \quad (C.14)$$

Fejezzük ki $T_L(r, t)$ deriváltjait:

$$\frac{\partial T_L(z(r, t), t)}{\partial t} = \frac{\partial T_L(z, t)}{\partial t} + \frac{\partial T_L(z, t)}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial t} = \frac{\partial T_L}{\partial t} + z \frac{\dot{R}}{R} \frac{\partial T_L}{\partial z}. \quad (C.15)$$

$$\frac{\partial T_L(z(r, t), t)}{\partial r} = \frac{\partial T_L(z, t)}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial r} = -z^2 \frac{1}{R} \frac{\partial T_L}{\partial z}. \quad (C.16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_L(T_L, p_L) r^2 \frac{\partial T_L(z(r, t), t)}{\partial r} \right) &= 2r \lambda_L \frac{\partial T_L}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial r} + r^2 \left(\frac{\partial \lambda_L}{\partial T_L} \frac{\partial T_L}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial r} + \right. \\ &\left(\frac{\partial \lambda_L}{\partial p_L} \frac{\partial p_L}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial r} \right) \frac{\partial T_L}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial r} + r^2 \lambda_L \frac{\partial^2 T_L}{\partial z^2} \left(\frac{\partial z}{\partial r} \right)^2 + r^2 \lambda_L \frac{\partial T_L}{\partial z} \frac{\partial^2 z}{\partial r^2} = -2 \frac{R}{z} \lambda_L \frac{\partial T_L}{\partial z} z^2 \frac{1}{R} - \\ &\left(\frac{R}{z} \right)^2 \left(-\frac{\partial \lambda_L}{\partial T_L} \frac{\partial T_L}{\partial z} z^2 \frac{1}{R} - \frac{\partial \lambda_L}{\partial p_L} \frac{\partial p_L}{\partial z} z^2 \frac{1}{R} \right) \frac{\partial T_L}{\partial z} z^2 \frac{1}{R} + \left(\frac{R}{z} \right)^2 \lambda_L \frac{\partial^2 T_L}{\partial z^2} \left(\frac{z^2}{R^2} \right)^2 + \end{aligned} \quad (C.17)$$

$$\left(\frac{R}{z}\right)^2 \lambda_L \frac{\partial T_L}{\partial z} z^3 \frac{2}{R} = -2z\lambda_L \frac{\partial T_L}{\partial z} + z^2 \left(\frac{\partial \lambda_L}{\partial T_L} \frac{\partial T_L}{\partial z} + \frac{\partial \lambda_L}{\partial p_L} \frac{\partial p_L}{\partial z} \right) \frac{\partial T_L}{\partial z} +$$

$$z^2 \lambda_L \frac{\partial^2 T_L}{\partial z^2} + 2z\lambda_L \frac{\partial T_L}{\partial z} = z^2 \left(\frac{\partial \lambda_L}{\partial T_L} \frac{\partial T_L}{\partial z} + \frac{\partial \lambda_L}{\partial p_L} \frac{\partial p_L}{\partial z} \right) \frac{\partial T_L}{\partial z} + z^{2^2} \lambda_L \frac{\partial^2 T_L}{\partial z^2} = z^2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_L \frac{\partial T_L}{\partial z} \right).$$

A deriváltakra kapott összefüggéseket felhasználva az (C.11) energiaegyenlet:

$$\frac{\partial T_L}{\partial t} = -z \frac{\dot{R}}{R} \frac{\partial T_L}{\partial z} + u_L z^2 \frac{1}{R} \frac{\partial T_L}{\partial z} + C_2 \frac{z^2}{R^2} z^2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_L \frac{\partial T_L}{\partial z} \right), \quad (\text{C.18})$$

ahol:

$$C_2 = \frac{1}{\rho_L c_{pL}}, \quad (\text{C.19})$$

$$u_L = \dot{R} \cdot z^2. \quad (\text{C.20})$$

APPENDIX D. MATLAB KÓDRÉSZLETEK

D.1. Hővezetési egyenlet megoldása másodrendű centrális differencia sémával

```
function [CollocationPoints, Solution, Initial, ElapsedTime] =...
    SecondOrderCDSHeatDiffusion(InitialFunction, BoundaryConditions, DoF, Time,
Alfa)
syms x
global DifferentiationMatrix Boundary ThermalDiffusivity
NumberOfPoints = DoF;
CollocationPoints = linspace(1,-1,NumberOfPoints);
DifferentiationMatrix = CDSMatrix(CollocationPoints);
Boundary = BoundaryConditions;
ThermalDiffusivity = Alfa;
Initial = double(subs(InitialFunction, x, CollocationPoints));
odeoptions = odeset('RelTol', 1e-12, 'AbsTol', 1e-12);
tic;
[t, u] = ode45(@HeatDiffusionODE, [0 Time], Initial(2:end-1), odeoptions);
ElapsedTime=toc;
Solution = [Boundary(1); u(end,:).'; Boundary(2)];
end

function dudt = HeatDiffusionODE(t,u)
global DifferentiationMatrix Boundary ThermalDiffusivity
u_tot = zeros(length(u)+2,1);
u_tot(1,1) = Boundary(1);
u_tot(end,1) = Boundary(2);
u_tot(2:end-1) = u(:,1);
u_xx = ThermalDiffusivity*(DifferentiationMatrix^2)*u_tot;
dudt(:,1) = u_xx(2:end-1,1);
end
```

D.2. Hővezetési egyenlet megoldása Galerkin spektrál módszerrel

```
function [SpectralSolution, ElapsedTime] = GalerkinSpectral(InitialFunction, DoF,
Time)
syms f x PN
f=InitialFunction;
N=DoF+2;
Tn = ChebyshevPolynomial(N);
B = BasisFunctionsTn(Tn);
H = CoefficientMatrixTn(B);
L = DerCoeffMatrixTn(B);
global G
G=(H^-1)*L;
F=InnerProductTnf(B, f);
a0 = double((H^(-1))*F);
odeoptions = odeset('RelTol', 1e-12, 'AbsTol', 1e-12);
tic;
[t, a] = ode45(@DiffusionEquation, [0 Time], a0(:,1), odeoptions);
ElapsedTime=toc;
SpectralSolution = a(end,:)*B;
end

function dadt = DiffusionEquation(t,a)
global G
dadt(:,1) = double((G*a));
end
```

D.3. Hővezetési példa megoldása kollokációs módszerrel, nem periodikus perem

```
function [CollocationPoints, Solution, Initial, FittedPolynomial] =...
    CollocationHeatDiffusionExtrema(InitialFunction, BoundaryConditions, DoF,
Time, Alfa)
syms x
global DifferentiationMatrix Boundary ThermalDiffusivity
NumberOfPoints = DoF;
[CollocationPoints, ~] = ChebyshevExtremaGrid(NumberOfPoints);
DifferentiationMatrix = ChebyshevExtremaDiffMatrix(CollocationPoints);
Boundary = BoundaryConditions;
ThermalDiffusivity = Alfa;
Initial = double(subs(InitialFunction, x, CollocationPoints));
[t, u] = ode45(@HeatDiffusionODE, [0 Time], Initial(2:end-1,1));
Solution = [Boundary(1); u(end,:).'; Boundary(2)];
FittedPolynomial = ExtremaLagrange(CollocationPoints, Solution );
end

function dudt = HeatDiffusionODE(t,u)
global DifferentiationMatrix Boundary ThermalDiffusivity
u_tot = zeros(length(u)+2,1);
u_tot(1,1) = Boundary(1);
u_tot(end,1) = Boundary(2);
u_tot(2:end-1) = u(:,1);
u_xx = ThermalDiffusivity*(DifferentiationMatrix^2)*u_tot;
dudt(:,1) = u_xx(2:end-1,1);
end
```

D.4. Hővezetési példa megoldása kollokációs módszerrel, periodikus perem

```
function [CollocationPoints, Solution, Initial, FittedPolynomial] =...
    CollocationHeatDiffusionPeriodicExtrema(InitialFunction, BoundaryConditions,
DoF, Time, Alfa)
syms x
global DifferentiationMatrix Boundary ThermalDiffusivity
NumberOfPoints = DoF;
[CollocationPoints, ~] = FourierExtremaGrid(NumberOfPoints);
DifferentiationMatrix = FourierExtremaDiffMatrix(CollocationPoints);
Boundary = BoundaryConditions;
ThermalDiffusivity = Alfa;
Initial = double(subs(InitialFunction, x, CollocationPoints));
[t, u] = ode45(@HeatDiffusionODE, [0 Time], Initial(2:end,1));
Solution = [Boundary(1); u(end,:).'];
FittedPolynomial = ExtremaLagrangePeriodic(CollocationPoints, Solution );
end

function dudt = HeatDiffusionODE(t,u)
global DifferentiationMatrix Boundary ThermalDiffusivity
u_tot = zeros(length(u)+1,1);
u_tot(1,1) = Boundary(1);
u_tot(2:end) = u(:,1);
u_xx = ThermalDiffusivity*(DifferentiationMatrix^2)*u_tot;
dudt(:,1) = u_xx(2:end,1);
end
```

D.5. Hullámegyenlet megoldása kollokációs módszerrel, nem periodikus perem

```
function [CollocationPoints, Solution, Initial, ElapsedTime] = ...
    CollocationWaveEquationExtrema(InitialFunctions, BoundaryConditions, DoF,
    Time, Alfa, Savesolution)
syms x
global DifferentiationMatrix Boundary Wavevelocity
NumberofPoints = DoF;
[CollocationPoints, ~] = ChebyshevExtremaGrid(NumberofPoints);
DifferentiationMatrix = ChebyshevExtremaDiffMatrix(CollocationPoints);
Boundary = BoundaryConditions;
Wavevelocity = Alfa;
Initial = double(subs(InitialFunctions(1), x, CollocationPoints));
InitialVelocity = double(subs(InitialFunctions(2), x, CollocationPoints));
odeoptions = odeset('RelTol', 1e-12, 'AbsTol', 1e-12);
tic;
[t, u] = ode45(@WaveEquationODE, [0 Time], [Initial(2:end-1,1);
InitialVelocity(2:end-1,1)], odeoptions);
ElapsedTime =toc;
    if Savesolution == 1;
        dlmwrite(strcat('Results\Waves\Collocation_', num2str(Time), '.txt'), u)
    end
Solution = [Boundary(1,1); u(end,1:end/2).'; Boundary(1,2)];
end

function dudt = WaveEquationODE(t,u)
global DifferentiationMatrix Boundary Wavevelocity
u_tot = zeros(length(u)/2+2,1);
u_tot(1,1)    = Boundary(1,1);
u_tot(end,1)  = Boundary(1,2);
u_tot(2:end-1) = u(1:end/2,1);
u_x = u(end/2+1:end,1);
u_xx = (Wavevelocity^2)*(DifferentiationMatrix^2)*u_tot;
dudt(:, :) = [u_x; u_xx(2:end-1,1)];
end
```

D.6. Hullámegyenlet megoldása kollokációs módszerrel, periodikus perem

```
function [CollocationPoints, Solution, Initial, ElapsedTime] = ...
    CollocationWaveEquationExtrema(InitialFunctions, BoundaryConditions, DoF,
    Time, Alfa, Savesolution)
addpath('D:\BME\MSc\Diploma\Matlab\Codes\0Source');
syms x
global DifferentiationMatrix Boundary Wavevelocity
NumberofPoints = DoF;
[CollocationPoints, ~] = FourierExtremaGrid(NumberofPoints);
DifferentiationMatrix = FourierExtremaDiffMatrix(CollocationPoints);
Boundary = BoundaryConditions;
Wavevelocity = Alfa;
Initial = double(subs(InitialFunctions(1), x, CollocationPoints));
InitialVelocity = double(subs(InitialFunctions(2), x, CollocationPoints));
odeoptions = odeset('RelTol', 1e-12, 'AbsTol', 1e-12);
tic;
[t, u] = ode45(@WaveEquationODE, [0 Time], [Initial(2:end,1);
InitialVelocity(2:end,1)], odeoptions);
ElapsedTime = toc;
    if Savesolution == 1;
        dlmwrite(strcat('Results\Waves\Collocation_', num2str(Time), '.txt'), u)
    end
Solution = [Boundary(1); u(end,1:end/2).'];
end

function dudt = WaveEquationODE(t,u)
global DifferentiationMatrix Boundary Wavevelocity
u_tot = zeros(length(u)/2+1,1);
u_tot(1,1) = Boundary(1);
u_tot(2:end) = u(1:end/2,1);
u_x = u(end/2+1:end,1);
u_xx = (Wavevelocity^2)*(DifferentiationMatrix^2)*u_tot;
dudt(:, :) = [u_x; u_xx(2:end,1)];
end
```